

Química orgánica

Georgina Ipatia Moreno Andrade



ESPOCH
2024

Química orgánica

Georgina Ipatia Moreno Andrade



**Decanato
de Publicaciones**



esPOCH

Química orgánica

© 2024 Georgina Ipatia Moreno Andrade

© 2024 Escuela Superior Politécnica de Chimborazo

Panamericana Sur, kilómetro 1 ½

Decanato de Publicaciones

Riobamba, Ecuador

Teléfono: 593 (03) 2 998-200

Código Postal: EC0600155

Aval ESPOCH

Este libro se sometió a arbitraje bajo el sistema de doble ciego
(*peer review*)

Corrección y diseño:

La Caracola Editores

Impreso en Ecuador

Prohibida la reproducción de este libro, por cualquier medio,
sin la previa autorización por escrito de los propietarios del
Copyright

CDU: 547

Química orgánica

Riobamba: Escuela Superior Politécnica de Chimborazo

Decanato de Publicaciones, 2024

173 pp. vol: 17,6 x 25 cm

ISBN: 978-9942-48-585-4

1. Química Orgánica

*A mis hijos, hija y esposo
quienes han sido mi mayor fuente de inspiración y alegría.
Cada página de este libro, cada ecuación resuelta,
lleva impreso el amor y el apoyo constante que me han brindado.
Esta obra es el fruto de largos años de estudio, trabajo y dedicación a la docencia
Es una mezcla única de lo académico y lo personal.*

*A mis estudiantes
que han sido los reactivos fundamentales de cada fórmula química,
les dedico estas páginas para que amplíen su conocimiento y
tengan motivación para culminar con éxito sus estudios.*

ÍNDICE GENERAL

Introducción	
Capítulo I. Introducción a la Química Orgánica	11
1.1. Reseña Histórica.....	11
1.2. Propiedades de los compuestos orgánicos	12
1.3. Clasificación de los compuestos orgánicos	12
1.4. Clasificación en función de grupos funcionales	13
1.5. Análisis elemental orgánico	15
1.6. Fórmulas estructurales	16
1.6.1. Fórmula estructural de alcanos	16
1.6.2. Fórmula estructural de alquenos.....	17
1.6.3. Fórmula estructural de alquinos	18
1.6.4. Fórmula estructural de haluros	18
1.6.5. Fórmula estructural de hidroxilo	19
1.6.6. Fórmula estructural oxi.....	19
1.6.7. Fórmula estructural carbonilo.....	20
1.6.8. Fórmula estructural carboxilo.....	21
1.6.9. Fórmula estructural éster	22
1.6.10 Fórmula estructural amino.....	23
1.6.11. Fórmula estructural amida	23
1.6.12. Fórmula estructural nitrilo	24
1.6.13. Fórmula estructural nitro	25
1.7. Determinación de las fórmulas molecularesu	25
1.8. Ejercicios propuestos	26
Capítulo II. Compuestos del carbono.....	28
2.1. Enlace covalente.....	28
2.2. Polaridad de enlaces	29
2.2.1. Representación de potencial electrostático	30
2.3. Estabilidad, efectos y resonancia	31
2.3.1. Estabilidad	31
2.3.1.1. Factores que pueden afectar la estabilidad de los compuestos orgánicos.....	31

2.3.2. Efectos	34
2.3.2.1. Efectos electrónicos	34
2.3.2.2. Efectos estéricos	35
2.3.3. Resonancia	35
2.4. Hibridación e isomería	38
2.4.1. Hibridación	38
2.4.1.1. Hibridación sp^3	39
2.4.1.2. Hibridación sp^2	39
2.4.1.3. Hibridación sp	39
2.4.2. Isomería	40
2.4.2.1. Clasificación	40
2.4.2.1.1. Isomería constitucional	40
2.4.2.1.2. Isomería configuracional:	41
2.5. Grupos funcionales, Clasificación	42
2.5.1. Alcanos	42
2.5.1.1. Estructura y nomenclatura	42
2.5.2. Generalidades de los alcanos	43
2.5.3. Propiedades físicas de los alcanos	43
2.5.3.1. Punto de ebullición de los alcanos	43
2.6. Puntos de fusión de los alcanos	44
2.7. Mecanismo de reacción	45
2.7.1. Reacción de Craqueo e hidrocrqueo	45
2.8. Alquenos	46
2.8.1. Importancia comercial de los alquenos	46
2.8.2. Propiedades físicas de los alquenos	47
2.9. Polaridad	47
2.10. Mecanismo de reacción	48
2.10.1. Mecanismo de hidrobtoración de un alqueno	48
2.11. Alquinos	48
2.11.1. Estructura y nomenclatura	48
2.11.2. Propiedades físicas de los alquinos	49
2.11.3. Importancia comercial de los alquinos	
Usos del acetileno y del metilacetileno	50
2.12. Mecanismo de reacción	50
2.12.1. Reducción con metal-amoniaco de un Alquino	50
2.13. Alcoholes	52
2.13.1. Propiedades físicas de los alcoholes	52
2.13.2. Puntos de ebullición de los alcoholes	53

2.13.3. Propiedades de solubilidad de los alcoholes	53
2.13.4. Alcoholes comercialmente importantes.....	54
2.13.4.1. Metanol	54
2.13.5. Mecanismo de reacción	55
2.13.5.1. Mecanismo de la reacción con trihaluros de fósforo	55
2.14. Cetonas y aldehídos.....	55
2.14.1. Estructura de los compuestos carbonílicos.....	56
2.14.2. Propiedades físicas de las cetonas y aldehídos.....	56
2.14.3. Punto de fusión	57
2.14.4. Solubilidad.....	57
2.14.5. Importancia industrial de las cetonas y aldehídos	57
2.15. Éteres	59
2.15.1. Estructura y nomenclatura	59
2.15.2. Propiedades físicas de los éteres Polaridad y puntos de ebullición....	60
2.15.3. Solubilidad de los éteres	61
2.16. Ésteres	61
2.16.1. Propiedades Físicas de los ésteres	62
2.16.1.1. Polaridad y punto de ebullición	62
2.16.2. Solubilidad.....	62
2.16.3. Los ésteres y sus usos en la industria	62
2.16.4. Reacción de saponificación de ésteres.....	63
2.16.5. Reacción con reactivos de Grignard.....	64
2.16.6. Reducción de ésteres	64
2.17. Aminas.....	65
2.17.1. Nomenclatura de las aminas	65
2.17.2. Propiedades físicas de las aminas	65
2.17.2.1. Polaridad de las aminas	65
2.17.3. Punto de ebullición de las aminas	66
2.18. Amidas.....	67
2.18.1. Síntesis de amidas.....	67
2.18.2. Propiedades físicas de las amidas	68
2.18.3. Propiedades químicas	69
2.19. Derivados halogenuros	69
2.19.1. Estructura y nomenclatura	69
2.19.2. Clasificación de los derivados Halogenuros.....	69
2.20. Haluros de alquilo	70
2.20.1. Propiedades físicas de los haluros de alquilo	70
2.21. Ácidos carboxílicos	70

2.21.1. Estructura y Nomenclatura	70
2.21.2. Propiedades físicas de los ácidos carboxílicos	71
2.21.3. Nomenclatura orgánica.....	72
2.21.3.1. Nomenclatura de los diferentes grupos funcionales	72
2.21.4. Nomenclatura de Enantiómeros	72
2.21.5. Configuración Absoluta	73
2.21.6. Nomenclatura R y S.....	73
2.21.7. Nomenclatura E y Z.....	74
2.21.8. Rupturas homolíticas y heterolíticas	75
2.21.8.1. Ruptura homolítica	75
2.21.8.2. Ruptura heterolítica	76
2.22. Ejercicios propuestos	77
Capítulo III. Alcanos o parafinas	79
3.1. Introducción	79
3.2. Estructura, nomenclatura y propiedades físicas	80
3.2.1. Estructura.....	80
3.2.2. Nomenclatura	80
3.2.3. Nomenclatura Cis y Trans	81
3.2.4. Propiedades físicas	82
3.2.5. Métodos de preparación	82
3.2.5.1. Hidrogenación de alquenos:	82
3.2.5.2. Deshidrohalogenación de haluros de alquilo	82
3.2.5.3. Reducción de aldehídos y cetonas:	83
3.2.6. Hidrólisis de haloalcanos:.....	83
3.2.7. Reacciones de sustitución radicalaria	84
3.2.7.1. Hidrolisis de reactivos de Grignard	85
3.2.8. Reacción de Wurtz.....	86
3.2.9. Síntesis de Kolbe	86
3.2.10. Síntesis de Corey-House.....	87
3.2.11. Aplicaciones.....	87
3.3. Ejercicios propuestos:	88
Capítulo IV. Alquenos u olefinas	90
4.1. Introducción	90
4.2. Estructura, nomenclatura y propiedades físicas	90
4.2.1. Estructura.....	90
4.2.2. Nomenclatura	91

4.2.3. Propiedades físicas	92
4.2.4. Métodos de preparación	93
4.2.4.1. Hidrogenación de alquino	93
4.2.4.2. Hidrogenación de alquinos a alquenos	93
4.2.4.3. Deshidratación de alcoholes	95
4.2.5. Isomería Geométrica	96
4.2.6. Mecanismos de reacción.....	97
4.2.6.1. Sulfatación	97
4.2.6.2. Dimerización.....	98
4.2.6.3. Carbenos	99
4.2.7. Preparación de epóxidos.....	100
4.2.8. Preparación de glicoles.....	101
4.3. Polimerización.....	102
4.3.1. Aplicaciones	102
4.4. Problemas propuestos.....	103
Capítulo V	105
5.1. Introducción	105
5.2. Estructura, nomenclatura y propiedades físicas	106
5.2.1. Estructura.....	106
5.2.2. Nomenclatura	107
5.2.3. Propiedades físicas	107
5.2.4. Métodos de preparación	108
5.2.4.1. Deshidrohalogenación de halogenuros	108
5.2.5. Alquilación de acetiluros	110
5.2.6. Obtención del acetileno	111
5.2.7. Mecanismos de Reacción	112
5.2.7.1. Hidrogenación sin: obtención de alquenos cis.....	112
5.2.7.2. Hidrogenación anti: obtención de alquenos trans	113
5.2.7.3. Adición de ácido	114
5.2.7.4. Adición de agua	114
5.2.7.5. Ozonólisis	115
5.2.7.6. Oximercuración desmercuración de los alquinos	115
5.2.7.7. Hidroboración oxidación de los alquinos	116
5.2.7.8. Ruptura del triple enlace por oxidación.....	118
5.3. Dienes y polienos	118
5.3.1. Aplicaciones	119
5.3.2. Vinilación.....	119

5.4. Ejercicios propuestos	120
Glosario de términos	123
Bibliografía	124

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.1. Propiedades de los compuestos orgánicos	12
Tabla 1.2. Monómero y polímero	13
Tabla 1.3. Clasificación en función de grupos funcionales	14
Tabla 1.4. Clasificación en función de grupos funcionales	15
Tabla 1.5. Fórmulas estructurales alcanos	17
Tabla 1.6. Fórmulas estructurales alquenos	17
Tabla 1.7. Fórmula estructural de alquinos	18
Tabla 1.8. Fórmulas estructurales haluros	19
Tabla 1.9. Fórmulas estructurales hidroxilos.	19
Tabla 1.10. Fórmulas estructurales oxi	20
Tabla 1.11. Fórmulas estructurales carbonilo	21
Tabla 1.12. Fórmulas estructurales carboxilos	22
Tabla 1.13. Fórmulas estructurales acetatos de metilo	22
Tabla 1.14. Fórmulas estructurales aminas	23
Tabla 1.15. Fórmulas estructurales amidas	24
Tabla 1.16. Fórmulas estructurales nitrilos	24
Tabla 1.17. Fórmulas estructurales nitro	25
Tabla 2.1. Fórmulas y propiedades físicas alcanos no ramificados, llamados n-alcanos	44
Tabla 2.2. Propiedades físicas de alquinos seleccionados	49
Tabla 2.3. Ejemplos de alcoholes	52
Tabla 2.4. Propiedades físicas de alcoholes seleccionados	53
Tabla 2.5. Propiedades físicas de las cetonas y aldehídos	56
Tabla 2.6. Cetonas y Aldehídos en productos domésticos.	59
Tabla 2.7. Propiedades físicas de los éteres	60
Tabla 2.8. Características relevantes de los ésteres	63
Tabla 2.9. Puntos de fusión, puntos de ebullición y solubilidades en agua de algunas aminas sencillas	66
Tabla 2.10. Ejemplos de haluros de alquilo	69
Tabla 2.11. Ejemplos de ácidos carboxílicos comunes.	71
Tabla 2.12. Nomenclatura de los diferentes grupos funcionales	72

Tabla 4.1. Propiedades físicas	93
--------------------------------------	----

Tabla 5.1. Propiedades físicas de alquinos seleccionados	108
--	-----

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1. Representación gráfica del enlace covalente	28
Figura 2.2. Enlace covalente de la molécula de hidrógeno.....	29
Figura 2.3. Estructura del cloro-metano (a) Fórmula estructural; (b) Fórmula espacial.	30
Figura 2.4. Aumento de electronegatividad en la tabla periódica.....	30
Figura 2.5. Orden de estabilidad de los carbocationes.....	33
Figura 2.6. El isopentilo es más estable que el isobutilo	33
Figura 2.7. El isohexilo es más estable que el isobutilo	34
Figura 2.8. Representación espacial de la molécula de metano.....	39
Figura 2.9. Representación espacial del eteno.	39
Figura 2.10. Representación espacial del etino.....	40
Figura 2.11. Ejemplos de isomería de cadena.....	40
Figura 2.12. Ejemplos de isomería de posición	41
Figura 2.13. Ejemplos de isomería de función	41
Figura 2.14. Ejemplos de tautomería	41
Figura 2.15. Ejemplos isomería geométrica	42
Figura 2.16. Ejemplos isomería óptica	42
Figura 2.17. Hidrocraqueo catalítico	45
Figura 2.18. Craqueo catalítico	45
Figura 2.19. Compuestos que presentan hibridación sp^2	46
Figura 2.20. Cloruro de vinilo.....	47
Figura 2.21. Mecanismo de hidrobtoración de un alqueno.....	48
Figura 2.22. Acetileno	50
Figura 2.23. Metanol	54
Figura 2.24. Etanol.....	54
Figura 2.25. Reacción de alcoholes con PBr_3	55
Figura 2.26. Reacción de alcoholes con PBr_3	55
Figura 2.27. Representación de los grupos carbonílicos.....	56
Figura 2.28. Usos de aldehídos y cetonas a nivel industrial	58
Figura 2.29. Uso del acetaldehído como materia prima	58
Figura 2.30. Estructuras de éteres	59

Figura 2.31. Ejemplos de estructuras de ésteres	62
Figura 2.32. Representación de la saponificación de los éteres	63
Figura 2.33. Reacción de los ésteres con el Reactivo de Grignard.....	64
Figura 2.34. Reducción de los ésteres.....	64
Figura 2.35. Clasificación de las amidas.....	67
Figura 2.36. Polaridad de las amidas	68
Figura 2.37. Representación de los enlaces intermoleculares de las amidas	68
Figura 2.38. Ejemplos de haluros de alquilo y de arilo	70
Figura 2.39. Dimerización de un ácido carboxílico	71
Figura 2.40. Imagen especular	72
Figura 2.41. Enantiómeros	74
Figura 2.42. Representación de la nomenclatura geométrica (a) Cis y (b) Trans ...	74
Figura 2.43. Nomenclatura Cis y Trans	75
 Figura 3.1. Representación de la hibridación sp^3	80
Figura 3.2. Uso de prefijo	81
Figura 3.3. La terminación -ano para todos los alcanos y cicloalcanos.....	81
Figura 3.4. Nomenclatura Cis y Trans	81
Figura 3.5. Los haluros del alquino	83
Figura 3.6. Pasos de una reacción	85
Figura 3.7. Reacción de Grignard	85
Figura 3.8. Reacción de Wurtz.....	86
Figura 3.9. Síntesis de Kolbe	87
Figura 3.10. Síntesis de Corey-House.....	87
 Figura 4.1. Isómeros cis-trans	92
Figura 4.2. Hidrogenación de alquino.....	94
Figura 4.3. 1-buteno y 2-buteno.....	94
Figura 4.4. Isómeros geométricos para el compuesto $CH_3-CH-COOH$	96
Figura 4.5. 2-sulfato ácido de isopropilo	97
Figura 4.6. Reacción de dimerización.....	98
Figura 4.7. Mecanismo de reacción de dimerización	98
Figura 4.8. Representación de los estados de basales de los carbenos	99
Figura 4.9. Dibromocarbano	100
Figura 4.10. Óxido de etileno	100
Figura 4.11. Fabricación de diferentes productos plásticos	103

Figura 5.1. Molécula de acetileno	106
Figura 5.2. Representación de los alquinos	107
Figura 5.3. Preparación de alquinos	109

INTRODUCCIÓN

La química orgánica es aquella rama de la Química que se dedica al estudio de los compuestos que contienen principalmente carbono e hidrógeno en su estructura, aunque también pueden incluir otros elementos como nitrógeno, oxígeno, azufre, fósforo, entre otros. Estos compuestos, conocidos como compuestos orgánicos, son fundamentales en numerosos aspectos de nuestra vida cotidiana, desde los materiales que utilizamos hasta los medicamentos que nos ayudan a superar padecimientos y enfermedades.

En este viaje a través de la química orgánica, nos adentraremos en los principios fundamentales de la materia, abordándolos desde una óptica contemporánea y avanzada. Examinaremos con detalle las estructuras, propiedades y la reactividad de los compuestos orgánicos, así como las técnicas más innovadoras en síntesis y caracterización. Además, introduciremos conceptos clave como la estructura molecular, las reacciones químicas, la estereoquímica, la resonancia y la aromaticidad, entre otros aspectos cruciales de la química orgánica.

En el Capítulo 1, “Introducción a la Química Orgánica”, se exploran las propiedades distintivas de los compuestos orgánicos y se establece su clasificación atendiendo a su estructura molecular. Se exponen, asimismo, los métodos para el análisis elemental y la determinación de las fórmulas moleculares, poniendo las bases para el estudio profundo de esta fascinante rama de la química.

En el Capítulo 2, “Compuestos del Carbono”, se centra en una exploración exhaustiva del enlace covalente, discutiendo su estabilidad, los efectos electrónicos y la resonancia. También se adentra en temas como la hibridación de orbitales y la isomería, esenciales para entender la diversidad estructural de las moléculas orgánicas. Se examinan las funciones químicas orgánicas y los grupos funcionales, proporcionando una clasificación detallada de los mismos. Además, se dedica una sección al estudio de la nomenclatura orgánica, vital para la comunicación científica precisa en la química. Se analizan los tipos de rupturas de enlaces, tanto homolíticas como heterolíticas, y se introducen a los estudiantes en el mundo de los reactivos nucleófilos y electrófilos, componentes clave en las reacciones químicas orgánicas.

En el Capítulo 3, “Alcanos o Parafinas”, se describen la estructura, nomenclatura y propiedades físicas de los alcanos, y se presentan los métodos de preparación. Asimismo, se detallan las reacciones de sustitución radicalaria, los mecanismos de reacción, las reacciones de Grignard y sus aplicaciones.

En el Capítulo 4, “Alquenos u Olefinas”, se profundiza en la estructura, nomenclatura y propiedades físicas de los alquenos, y se presentan los métodos de preparación. También se estudia la isomería geométrica, los mecanismos de reacción, la polimerización y sus aplicaciones.

En el Capítulo 5, “Alquinos o Acetilenos”, se aborda la estructura, nomenclatura y propiedades físicas de los alquinos, además se describen los métodos de preparación. Asimismo, se discuten los mecanismos de reacción, los dienos y polienos, así como sus aplicaciones.

Dra. MSc. Georgina Ipatia Moreno Andrade
Docente Facultad de Ciencias Pecuarias
Escuela Superior Politécnica de Chimborazo
Riobamba – Ecuador 2024

CAPÍTULO I.

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA ORGÁNICA

1.1. RESEÑA HISTÓRICA



Friedrich Wöhler

La química orgánica se originó en el siglo XVI-II a partir de la creencia de que los compuestos orgánicos se derivaban exclusivamente de organismos vivos y, por lo tanto, eran diferentes de los compuestos inorgánicos. Sin embargo, en 1828, Friedrich Wöhler logró sintetizar urea, un compuesto orgánico, a partir de sustancias inorgánicas, lo que demostró que los compuestos orgánicos podían obtenerse por síntesis y no solo por procesos biológicos.

A partir de entonces, los químicos comenzaron a sintetizar otros compuestos orgánicos, lo que llevó a la aparición de la química orgánica como una rama independiente de la química. Durante el decimonoveno siglo, la química experimentó avances significativos con la identificación y creación de numerosos compuestos orgánicos fundamentales, incluidos, pero no limitados a, hidrocarburos, alcoholes, éteres, aldehídos y cetonas. Estos descubrimientos fueron cruciales para el posterior auge de la industria química.

Con la transición del siglo XIX al XX, se produjo un cambio paradigmático en el entendimiento de la estructura molecular de los compuestos orgánicos. Científicos de la talla de August Kekulé y Archibald Scott Couper proporcionarán avances notables en este ámbito. De igual importancia fue la teoría de la valencia introducida por el químico Gilbert N. Lewis en 1916, la cual fue instrumental en refinar nuestro conocimiento sobre cómo los átomos se unen e interactúan en la química orgánica.

En la segunda parte del siglo XX, la química orgánica se expandió a nuevos dominios sin precedentes. Se ramificó en campos especializados como la química de los polímeros, la ciencia de materiales y la síntesis asimétrica, lo que amplió significativamente su campo de aplicación. Además, la aparición de técnicas analíticas avanzadas, como la espectroscopia, la cromatografía y la resonancia magnética nuclear, proporcionó a los investigadores herramientas avanzadas para desentrañar la estructura y propiedades de los compuestos orgánicos con un nivel de detalle nunca antes visto.

En conclusión, la historia de la química orgánica es un relato de evolución y avance sostenido. Ha transitado desde su concepción primitiva, que postulaba que los compuestos orgánicos eran exclusivos de seres vivos, hasta erigirse como una ciencia autónoma e integral que es piedra angular de la química contemporánea.

1.2. PROPIEDADES DE LOS COMPUESTOS ORGÁNICOS

Los compuestos orgánicos, definidos por la presencia de carbono en su estructura molecular, se encuentran en una amplia gama de materiales y sustancias que abarcan desde alimentos y medicamentos hasta plásticos y combustibles. Estos compuestos exhiben una diversidad de propiedades que fluctúan en función de su configuración química. No obstante, algunas manifiestan las siguientes características:

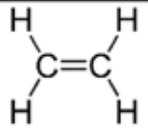
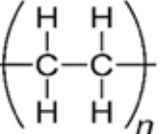
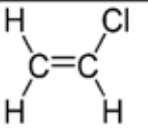
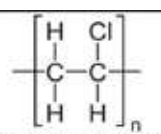
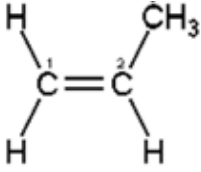
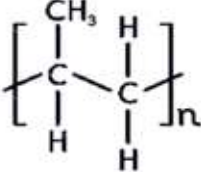
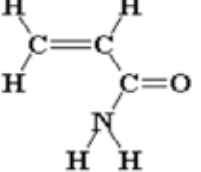
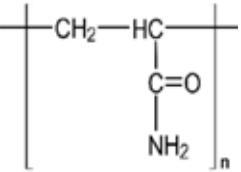
Tabla 1.1. Propiedades de los compuestos orgánicos

Propiedades
Pueden ser sólidos, líquidos o gaseosos a temperatura ambiente y presión atmosférica normal.
Presentan alta inflamabilidad en presencia de oxígeno.
Tienen una elevada reactividad química y establecen enlaces covalentes con átomos de carbono, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno y otros elementos.
Tienen una baja solubilidad en agua, pero pueden disolverse en solventes orgánicos como el etanol, metanol, benceno y otros.
Dependiendo de su estructura química, tienen propiedades ácidas o básicas.
Son utilizados como materiales plásticos, combustibles y lubricante.

1.3. CLASIFICACIÓN DE LOS COMPUESTOS ORGÁNICOS

La clasificación de los compuestos orgánicos puede realizarse de diversas maneras, atendiendo a su origen (natural o sintético), a su estructura (alifático o aromático), a su funcionalidad (alcoholes o cetonas), o a su peso molecular (monómeros o polímeros).

Tabla 1.2. Monómero y polímero

Monómero y Polímero			
Monómero sintético	Polímero derivado	Monómero sintético	Polímero derivado
 Eteno (Etileno)	 Polietileno PE	 Cloruro de vinilo (VC)	 Policloruro de vinilo (PVC)
 Propeno (Propileno)	 Polipropileno (PP)	 Acrilamida	 Poliacrilamida (PA)

Fuente: Wade (2011).

1.4. CLASIFICACIÓN EN FUNCIÓN DE GRUPOS FUNCIONALES

Los grupos funcionales se clasifican según la presencia de átomos y/o enlaces específicos en las moléculas orgánicas. Los grupos funcionales más comunes son los siguientes:

Hidrocarburos alifáticos: son compuestos orgánicos que solo contienen átomos de carbono e hidrógeno. Los hidrocarburos alifáticos se dividen en tres categorías: alcanos, alquenos y alquinos.

Hidrocarburos aromáticos: son compuestos orgánicos que tienen seis átomos de carbono unidos por enlaces covalentes simples y dobles. Estos átomos forman anillos aromáticos con una fuerte estabilidad.

Alcoholes: son compuestos orgánicos que contienen un grupo hidroxilo (-OH) unido a un átomo de carbono. Los alcoholes se nombran según el número de átomos de carbono y el sufijo “-ol”.

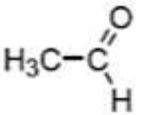
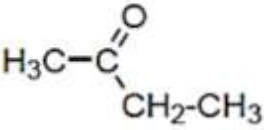
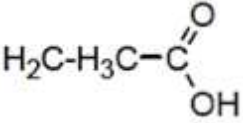
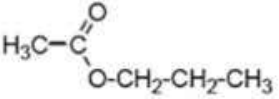
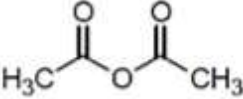
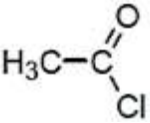
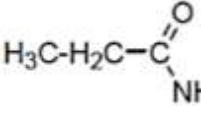
Aldehídos: son compuestos orgánicos que contienen el grupo funcional carbonilo (-C=O) unido a un átomo de hidrógeno y un grupo alquilo o arilo. Los aldehídos se nombran cambiando el sufijo “-o” del nombre del hidrocarburo correspondiente por el sufijo “-al”.

Cetonas: son compuestos orgánicos que contienen el grupo funcional carbonilo (-C=O) unido a dos grupos alquilo o arilos diferentes. Las cetonas se nombran cambiando el sufijo “-o” del nombre del hidrocarburo correspondiente por el sufijo “-ona”. **Ácidos carboxílicos:** son compuestos orgánicos que contienen el grupo funcional carboxilo (-COOH) unido a un átomo de carbono. Los ácidos carboxílicos se nombran cambiando el sufijo “-o” del nombre del hidrocarburo correspondiente por el sufijo “-oico”.

Ésteres: son compuestos orgánicos que contienen el grupo funcional éster (-COO-) formado por la unión de un ácido carboxílico y un alcohol. Los ésteres se nombran cambiando el sufijo “-oico” del ácido carboxílico por el sufijo “-ato” y el nombre del grupo alquilo o arilo del alcohol por el nombre del ácido carboxílico correspondiente.

Aminas: son compuestos orgánicos que contienen el grupo funcional amino (-NH_2) unido a un átomo de carbono. Las aminas se nombran según el número de grupos amino y el sufijo “-amin”.

Tabla 1.3. Clasificación en función de grupos funcionales

Función	Radicales	Estructura	Nombre
Haluro alquilo de	$R-CH_2-X$	$CH_3-CH_2-CH_2-Br$	1-bromopropano
Alcohol (primario)	$R-CH_2-OH$	$CH_3-CH_2-CH_2-OH$	1-propanol
Éter	$R-O-R'$	$CH_3-CH_2-O-CH_2-CH_3$	etoxietano (dietil éter)
Aldehído	$R-C(O)H$		etanal (acetaldehído)
Cetona	$R-C(O)-R'$		butanona (metil etil cetona)
Ácido carboxílico	$R-C(O)OH$		ácido propanoico (ácido propiónico)
Ester	$R-C(O)OR'$		etanoato de 1-propilo
Anhídrido	$R-C(O)-O-C(O)-R'$		anhídrido etanoico (anhídrido acético)
Haluro de acilo	$R-C(O)X$		cloruro de etanoílo (cloruro de acetilo)
Nitrilo	$R-CN$	$CH_3-C\equiv N$	etanonitrilo (acetónitrilo)
Amina (primaria)	$R-CH_2-NH_2$	$CH_3-CH_2-NH_2$	etilamina
Amida	$R-C(O)NH_2$		propanamida

1.5. ANÁLISIS ELEMENTAL ORGÁNICO

El análisis elemental orgánico es una técnica cuantitativa utilizada en la química orgánica para determinar la proporción de elementos presentes en una muestra orgánica. Este método se lleva a cabo mediante la combustión de la muestra en un ambiente controlado con oxígeno puro, lo que da como resultado la formación de gases como dióxido de carbono, agua y otros componentes.

Tabla 1.4. Clasificación en función de grupos funcionales

Pasos principales del análisis elemental orgánico	Descripción	Muestra gráfica
Preparación de la muestra	La muestra orgánica se seca y se pulveriza para obtener una muestra homogénea y representativa.	
Combustión de la muestra	La muestra se introduce en un horno de combustión y se quema a alta temperatura en presencia de oxígeno puro. Durante la combustión, el carbono y el hidrógeno de la muestra se oxidan a dióxido de carbono y agua, respectivamente.	
Separación y detección de los gases	Los gases resultantes de la combustión (CO_2 , H_2O y N_2) se separan mediante técnicas de cromatografía y se detectan mediante detectores específicos.	
Análisis de los datos	A partir de los datos obtenidos de la separación y detección de los gases, se calcula la composición elemental del compuesto orgánico analizado.	

Como se puede observar en la tabla 1.4, el análisis elemental orgánico es una técnica valiosa para determinar la pureza de la muestra, debido a que las impurezas presentes pueden alterar los resultados del análisis elemental. Este método es eficaz para discernir la composición elemental de la muestra, pero no ofrece detalles sobre su estructura molecular.

1.6. FÓRMULAS ESTRUCTURALES

La fórmula estructural de un compuesto orgánico describe la estructura molecular detallada del compuesto, incluyendo la disposición de los átomos y los enlaces entre ellos. La fórmula estructural se representa utilizando símbolos y líneas que representan los enlaces entre los átomos.

Por ejemplo, la fórmula estructural del etano, un compuesto orgánico simple, es:



Esto indica que el etano consta de dos átomos de carbono unidos por un enlace simple y rodeado por átomos de hidrógeno. En la representación de enlaces químicos, una línea recta simboliza el enlace covalente que une dos átomos de carbono. Es importante señalar que la fórmula estructural de un compuesto puede cambiar en función de su disposición espacial, motivo por el cual se recurre a diversas notaciones para ilustrar las distintas conformaciones de los compuestos orgánicos. Entre estas, la proyección de Fischer y la proyección de Newman son herramientas gráficas utilizadas para describir con precisión la orientación espacial de los átomos en la molécula.

1.6.1. Fórmula estructural de alcanos

Los alcanos, también conocidos como parafinas, son una clase de hidrocarburos saturados que contienen únicamente átomos de carbono e hidrógeno enlazados por enlaces simples. La fórmula general de un alcano lineal es C_nH_{2n+2} , donde “n” representa el número de átomos de carbono en la molécula. A continuación, se muestran las fórmulas estructurales para los tres primeros miembros de la serie de alcanos:

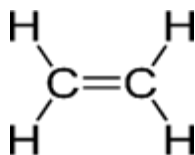
Tabla 1.5. Fórmulas estructurales alcanos

Fórmulas Estructurales		
Etano: C_2H_6	Propano: C_3H_8	Butano: C_4H_{10}
<pre> H H H — C — C — H H H </pre>	<pre> H H H H — C — C — C — H H H H </pre>	<pre> H H H H H — C — C — C — C — H H H H H </pre>

Cada átomo de carbono en la cadena de un alcano está unido a dos átomos de hidrógeno, excepto por los extremos de la cadena, que están unidos a tres átomos de hidrógeno. La disposición espacial de los átomos de hidrógeno puede variar en función de la estructura tridimensional del compuesto.

1.6.2. Fórmula estructural de alquenos

Los alquenos son hidrocarburos insaturados que contienen un doble enlace carbono-carbono en su estructura. Su fórmula general es C_nH_{2n} , donde “n” es el número de átomos de carbono en la molécula. La fórmula estructural general de un alqueno es:



(1.2)

Ejemplo:

A continuación, se presentan las fórmulas estructurales de los primeros 3 alquenos:

Tabla 1.6. Fórmulas estructurales alquenos

Fórmulas Estructurales		
Eteno: C_2H_4	Propeno: C_3H_6	Buteno: C_4H_8
		1-Buteno 2-Buteno

Cada átomo de carbono en la cadena de un alqueno está unido a dos átomos de hidrógeno, excepto por los átomos de carbono que participan en el doble enlace, que están unidos a un átomo de hidrógeno y otro átomo de carbono. La presencia del doble enlace en los alquenos les da una mayor reactividad química en comparación con los alcanos.

Donde los átomos de carbono están unidos por un doble enlace y cada uno tiene dos átomos de hidrógeno unidos a él.

1.6.3. Fórmula estructural de alquinos

Los alquinos son hidrocarburos insaturados que contienen un triple enlace entre dos átomos de carbono en la cadena. La fórmula general para un alquino es C_nH_{2n-2} , donde “n” es el número de átomos de carbono en la cadena.

Propino: C_3H_4	Butino: C_4H_6

Cada átomo de carbono en la cadena de un alquino está unido a un átomo de hidrógeno y otro átomo de carbono, excepto por los extremos de la cadena, que están unidos a un átomo de hidrógeno. La presencia del triple enlace en los alquinos les confiere una mayor reactividad química en comparación con los alcanos y alquenos.

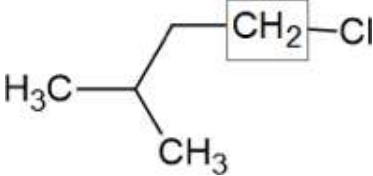
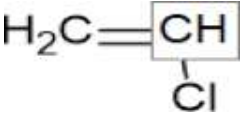
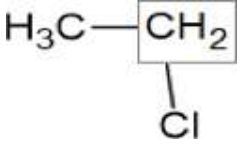
1.6.4. Fórmula estructural de haluros

Los haluros son compuestos orgánicos que contienen halógenos, que son elementos como el flúor, cloro, bromo o yodo. La fórmula estructural de un haluro depende del tipo de halógeno y del resto de la molécula. Por ejemplo, la fórmula de un haluro simple, como el cloro metano es CH_3Cl . Esto indica que hay un átomo de carbono (C) unido a tres átomos de hidrógeno (H) y un átomo de cloro (Cl).

En el caso de haluros de alquilo, como el bromuro de metilo, la fórmula estructural sería CH_3Br . Esto indica que hay un átomo de carbono (C) unido a tres átomos de hidrógeno (H) y un átomo de bromo (Br).

Para los haluros de arilo, como el clorobenceno, la fórmula estructural sería C_6H_5Cl . Esto significa la presencia de un anillo de benceno unido a un átomo de cloro (Cl).

Tabla 1.8. Fórmulas estructurales haluros

Fórmulas Estructurales		
1-cloro, 3 metilbutano: C_4H_9Cl	Cloroeteno: C_2H_3Cl	Cloroetano: C_2H_5Cl
		

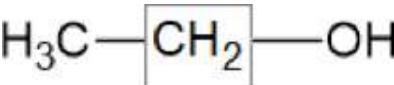
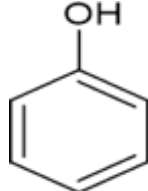
1.6.5. Fórmula estructural de hidroxilo

El hidroxilo es un grupo funcional que consiste en un átomo de oxígeno (O) unido a un átomo de hidrógeno (H), y se representa químicamente como “-OH”. En la fórmula estructural, el átomo de oxígeno se une covalentemente al átomo de hidrógeno a través de un enlace sencillo y a su vez, el átomo de oxígeno también se une a otro átomo o grupo de átomos en la molécula orgánica.

Por ejemplo, en el caso del alcohol metanol, la fórmula estructural del hidroxilo sería -OH, y la fórmula estructural completa sería CH_3OH .

En el caso de un ácido carboxílico, como el ácido acético, la fórmula estructural del hidroxilo tiene el grupo carboxilo, que es -COOH. El hidroxilo se une por enlaces covalentes al átomo de carbono del grupo carbonilo ($C=O$) y al átomo de hidrógeno del grupo hidroxilo (OH), formando un enlace de hidrógeno intramolecular.

Tabla 1.9. Fórmulas estructurales hidroxilos.

Fórmulas Estructurales		
Metanol: CH_3OH	Alcohol etílico: C_2H_5OH	Fenol: C_6H_5OH
		

1.6.6. Fórmula estructural oxi

Los éteres son compuestos orgánicos que tienen un grupo funcional éter (-O-) en su estructura molecular. Los átomos de oxígeno en el grupo éter están unidos covalentemente a dos grupos alquilo o arilo, lo que resulta en una molécula con una fórmula general $R-O-R'$, donde R y R' son grupos alquilo o arilo diferente. La fórmula estructural general de los éteres se puede representarse de la siguiente manera:

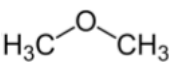
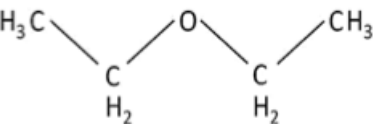
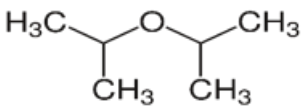


Donde R y R' son grupos alquilo o arilos iguales o diferentes entre sí. El éter dietílico, también conocido como éter etílico o simplemente éter, es uno de los éteres más comunes y se utiliza frecuentemente como solvente en laboratorios y en la industria. Su fórmula estructural es:



Esta estructura muestra que el éter dietílico está compuesto por dos grupos etilo (CH_3-CH_2) unidos a un átomo de oxígeno central. Aquí, tanto R como R' son grupos etilo y son idénticos, lo que hace que el éter dietílico sea un éter simétrico. En términos de estructura, los éteres carecen de la polaridad de las moléculas de agua, aunque todavía tienen un momento dipolar debido al átomo de oxígeno, lo que los hace relativamente buenos solventes para una variedad de compuestos orgánicos.

Tabla 1.10. Fórmulas estructurales oxi

Fórmulas Estructurales		
Éter dimetílico: CH_3-O-CH_3	Eter dietílico: $(CH_3-CH_2)_2-O$	Eter isopropílico: $(CH_3)_2CHOCH(CH_3)_2$
		

1.6.7. Fórmula estructural carbonilo

El grupo carbonilo es un grupo funcional clave en la química orgánica, caracterizado por un átomo de carbono enlazado doblemente a un átomo de oxígeno ($C=O$). Este enlace doble es polar debido a la diferencia de electronegatividad entre el carbono y el oxígeno, otorgando al grupo carbonilo propiedades químicas distintivas.

La representación general del grupo carbonilo es $C=O$, donde el doble enlace está representado por dos líneas paralelas entre el carbono y el oxígeno. La naturaleza de los compuestos que contienen este grupo funcional varía dependiendo de la posición del grupo carbonilo y los grupos unidos al átomo de carbono:

En los aldehídos, el grupo carbonilo está situado en el extremo de la cadena carbonada y siempre está unido al menos a un átomo de hidrógeno ($R-CHO$).

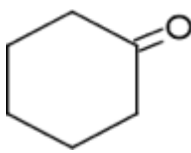
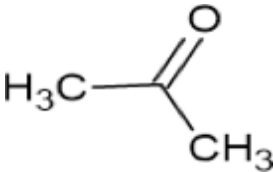
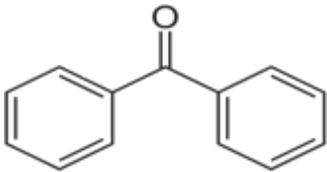
En las cetonas, el grupo carbonilo se encuentra entre dos cadenas de carbono y está unido a dos grupos alquilo o arilo.

Por ejemplo, en una cetona, donde R_1 y R_2 pueden ser iguales o diferentes, la fórmula estructural del grupo carbonilo se integra de la siguiente manera:



Se presentan los siguientes ejemplos

Tabla 1.11. Fórmulas estructurales carbonilo

Fórmulas Estructurales		
Ciclohexanona: $C_6H_{10}O$	Propanona: CH_3COCH_3	Eter isopropílico: $(CH_3)_2CHOCH(CH_3)_2$
		

1.6.8. Fórmula estructural carboxilo

El grupo carboxilo es un grupo funcional que se encuentra en los ácidos carboxílicos, que son compuestos orgánicos que contienen el grupo funcional -COOH. La fórmula estructural del grupo carboxilo se puede representar como sigue:



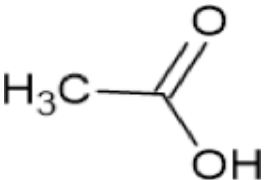
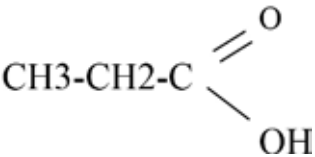
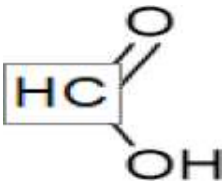
Donde la línea incorpora el enlace sencillo entre el átomo de carbono y el átomo de oxígeno, y el grupo hidroxilo (-OH) está unido al átomo de carbono a través de un enlace covalente sencillo.

La fórmula estructural del ácido etanoico, también conocido como ácido acético, que es un ácido carboxílico común, es:



En esta molécula, el grupo carboxilo (-COOH) está unido al extremo de una cadena de dos átomos de carbono (-CH₃) a través de un enlace covalente sencillo.

Tabla 1.12. Fórmulas estructurales carboxilos

Fórmulas Estructurales		
Ácido acético: CH ₃ COOH	Ácido propanoico: CH ₃ CH ₂ COOH	Ácido metanoico: HCOOH
		

1.6.9. Fórmula estructural éster

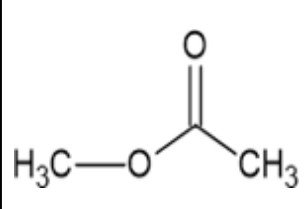
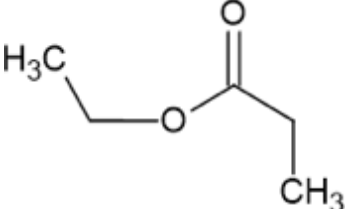
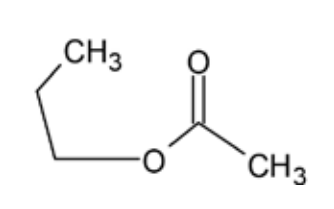
Los ésteres son compuestos orgánicos que tienen un grupo funcional éster (-COO-) en su estructura molecular. Los ésteres se forman a partir de la reacción entre un ácido carboxílico y un alcohol. La fórmula estructural de los ésteres se puede representar como sigue:



Los grupos R y R' representan cadenas alquilo o arilos distintos. La formación del grupo éster ocurre mediante la unión covalente del carbono carboxílico de un ácido con el oxígeno del grupo hidroxilo de un alcohol, dando lugar a un enlace característico conocido como enlace éster.

Tomemos como ejemplo el acetato de etilo, un éster ampliamente reconocido cuya estructura química se representa como $CH_3COOCH_2CH_3$. En esta molécula, el grupo acetilo (-COOCH₃) se origina de la reacción entre el ácido acético (CH₃COOH) y el etanol (CH₃CH₂OH). En esta reacción, el carbono del grupo carboxilo del ácido acético establece un enlace covalente con el oxígeno perteneciente al grupo hidroxilo del etanol, resultando en la formación del enlace éster.

Tabla 1.13. Fórmulas estructurales acetatos de metilo

Fórmulas Estructurales		
Acetato de metilo: CH_3COOCH_3	Propanoato de etilo: $CH_3CH_2COOCH_2CH_3$	Etanoato de propilo: $CH_3COOCH_2CH_2CH_3$
		

1.6.10. Fórmula estructural amino

El grupo amino ($-\text{NH}_2$) es un grupo funcional común en los compuestos orgánicos que contienen aminoácidos, proteínas, nucleótidos, amino azúcares, entre otros. La fórmula estructural del grupo amino se muestra a continuación:



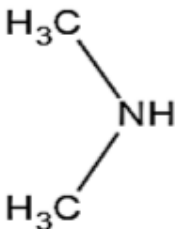
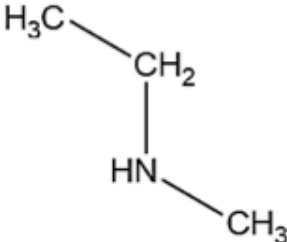
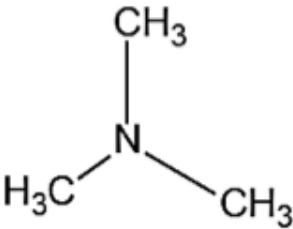
Donde los dos átomos de hidrógeno están unidos al átomo de nitrógeno a través de enlaces covalentes. El grupo amino tiene el comportamiento de una base débil y puede aceptar un protón para formar el catión amino NH_3^+ .

Por ejemplo, la glicina es un aminoácido simple que tiene la siguiente fórmula estructural:



El grupo amino ($-\text{NH}_2$) se encuentra unido al átomo de carbono del grupo carboxilo ($-\text{COOH}$), a través de un enlace covalente.

Tabla 1.14. Fórmulas estructurales aminas

Fórmulas Estructurales		
Dimetil Amina: CH_3NHCH_3	Etilmetil amina: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHCH}_3$	Trimetil amina: $(\text{CH}_3)_3\text{-N}$
		

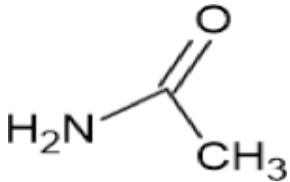
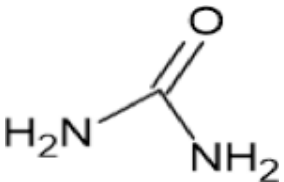
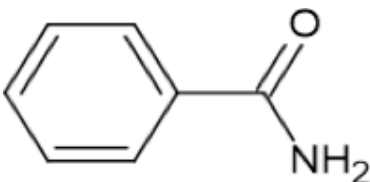
1.6.11. Fórmula estructural amida

El grupo amida funcional ($-\text{CONH}_2$) está presente en una amplia variedad de compuestos orgánicos, incluyendo aminoácidos, proteínas, péptidos, nucleótidos y algunos carbohidratos. La estructura general de una amida se puede representar como RCONH_2 , donde R es un grupo alquilo o arilo.

Las amidas se forman al interactuar un ácido carboxílico y una amina. En esta reacción, el carbono del grupo carboxilo ($-\text{COOH}$) se une al nitrógeno de la amina ($-\text{NH}_2$) por medio de un enlace covalente, dando origen al grupo amida ($-\text{CONH}_2$).

Un ejemplo es la acetamida, cuya fórmula es CH_3CONH_2 . En la molécula de acetamida, el grupo amida se origina de la reacción del ácido acético (CH_3COOH) con el amoníaco (NH_3).

Tabla 1.15. Fórmulas estructurales amidas

Fórmulas Estructurales		
Acetamida: CH_3CONH_2	Úrea: $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$	Benzamida: $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}$
		

1.6.12. Fórmula estructural nitrilo

El grupo funcional nitrilo ($-\text{CN}$) se encuentra comúnmente en compuestos orgánicos como los aminoácidos, los péptidos, los nucleótidos y los carbohidratos. La fórmula estructural del grupo nitrilo es la siguiente:



Donde R representa un grupo alquilo o arilo. En los nitrilos, el grupo funcional se forma a partir de la reacción entre un haluro de alquilo y cianuro de sodio, o a partir de la oxidación de una amina primaria.

Por ejemplo, la fórmula estructural del nitrilo etílico es la siguiente:



En esta molécula, el grupo nitrilo (-CN) se encuentra unido al átomo de carbono del etilo (CH_3CH_2) a través de un enlace triple covalente. Los nitrilos tienen propiedades químicas interesantes y se utilizan en la síntesis de una amplia variedad de productos químicos y farmacéuticos.

Tabla 1.16. Fórmulas estructurales nitrilos

Fórmulas Estructurales		
Propanonitrilo: $\text{C}_3\text{H}_3\text{N}$	Metanonitrilo: HCN	Etanonitrilo: $\text{C}_2\text{H}_3\text{N}$
$\text{H}_3\text{C}-\text{C}\equiv\text{CN}$	$\text{HC}\equiv\text{N}$	$\text{H}_3\text{C}-\text{C}\equiv\text{N}$

1.6.13. Fórmula estructural nitro

El grupo funcional nitro (-NO₂) se encuentra en muchos compuestos orgánicos como los nitroderivados de los hidrocarburos aromáticos, los cuales se utilizan en la síntesis de colorantes, explosivos y medicamentos. La fórmula estructural del grupo nitro es la siguiente:



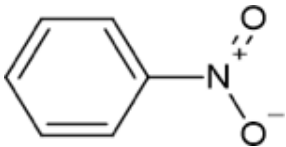
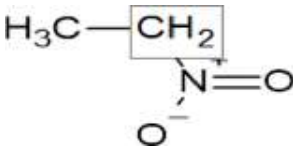
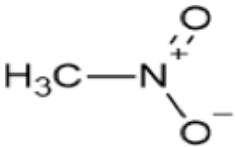
Donde R representa un grupo alquilo o arilo. En los nitroderivados, el grupo funcional se forma a partir de la sustitución de uno o varios átomos de hidrógeno del anillo aromático por grupos nitro (-NO₂) en una reacción de nitración.

Por ejemplo, la fórmula estructural del 2-nitrotolueno es la siguiente:



En esta molécula, el grupo funcional nitro (-NO_2) se encuentra unido al anillo aromático del tolueno ($\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$) a través de un enlace covalente doble entre el átomo de nitrógeno y uno de los átomos de oxígeno. Los nitroderivados tienen propiedades físicas y químicas interesantes como: punto de ebullición y fusión altos, colores amarillentos, además su reactividad le permite participar en reacciones de reducción, sustitución nucleofílica y adición nucleofílica, los nitroderivados se utilizan en diversas aplicaciones industriales y farmacéuticas.

Tabla 1.17. Fórmulas estructurales nitro

Fórmulas Estructurales		
Nitrobenceno: $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$	Nitroetano: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NO}_2$	Nitrometano: CH_3NO_2
		

1.7. DETERMINACIÓN DE LAS FÓRMULAS MOLECULARES

Existen diferentes tipos de fórmulas moleculares en compuestos químicos, dependiendo de la información que proporcionan sobre la composición de la molécula. Los distintos tipos de fórmulas moleculares ofrecen información esencial sobre los compuestos químicos y se pueden resumir como sigue:

Fórmula empírica: representa la proporción más simple de los átomos dentro de una molécula. Por ejemplo, la glucosa tiene una fórmula empírica CH_2O , que muestra la relación elemental mínima de carbono, hidrógeno y oxígeno en la molécula.

Fórmula molecular: esta fórmula indica el número exacto de cada tipo de átomo en una molécula. Para la glucosa, la fórmula molecular es $C_6H_{12}O_6$, lo que indica que cada molécula de glucosa consta de 6 átomos de carbono, 12 de hidrógeno y 6 de oxígeno.

Fórmula estructural: proporciona una representación visual de la disposición de los átomos y los enlaces que los conectan. Por ejemplo, la fórmula estructural del etanol es CH_3CH_2OH , que muestra cómo los átomos están vinculados entre sí.

Fórmula semidesarrollada: es una versión simplificada de la fórmula estructural donde se enfatizan los enlaces entre los átomos de carbono y se omite la representación de los enlaces a los hidrógenos, como se ve en el etano, CH_3-CH_3 , donde los dos carbonos están unidos por un enlace sencillo.

Fórmula condensada: es la representación que enumera los átomos secuencialmente, sin mostrar explícitamente los enlaces. Para el benceno, la fórmula condensada es C_6H_6 , lo que nos dice que la molécula contiene seis átomos de carbono y seis de hidrógeno.

1.8. EJERCICIOS PROPUESTOS

1. Defina y escriba un ejemplo para cada término

- | | |
|----------------------------|-------------------------|
| a) Isótopos | i) Enlace covalente |
| b) Orbital | j) Enlace sencillo |
| c) Nodo | k) Enlace doble |
| d) Orbitales degenerados | l) Enlace triple |
| e) Electrones de valencia | m) Formas de resonancia |
| f) Estructura de Lewis | n) Enlace polar |
| g) Enlace iónico | o) Cargas formales |
| h) Electrones no enlazados | p) Fórmula molecular |

- | | |
|-----------------------------------|------------------------------|
| q) Fórmula empírica | r) Ácido y base de Arrhenius |
| s) Ácido y base de Brønsted-Lowry | t) Ácido y base de Lewis |
| u) Electrófilo | v) Nucleófilo |

2. Mencione el elemento al que corresponden las siguientes configuraciones electrónicas

- a) $1s^2 2s^2 2p^2$
- b) $1s^2 2s^2 2p^4$
- c) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$

3. Hay una pequeña parte de la tabla periódica que debe conocer para hacer química orgánica. Construya esta parte de memoria, utilizando los siguientes pasos

- a) De memoria, haga una lista de los elementos de las dos primeras filas de la tabla periódica, junto con sus números de electrones de valencia.
- b) Utilice esta lista para construir las dos primeras filas de la tabla periódica.
- c) Los compuestos orgánicos con frecuencia contienen azufre, fósforo, cloro, bromo y yodo.

Agregue estos elementos a su tabla periódica.

4. Para cada compuesto, diga si sus enlaces son covalentes, iónicos o una combinación de covalentes y iónicos.

- | | | | |
|---------|-----------------------------|----------------------------|------------------|
| a) NaCl | c) CH_3Li | e) NaOCH_3 | g) CF_4 |
| b) NaOH | d) CH_2Cl_2 | f) HCO_2Na | |

5. Tanto el PC como el PCI son compuestos estables. Dibuje estructuras de Lewis para ambos compuestos.
6. El NCl_3 es un compuesto conocido, pero todos los intentos por sintetizar NCl_5 han fracasado. Dibuje estructuras de Lewis para el NCl_3 y un NCl_5 hipotético, y explique por qué el NCl_5 es una estructura improbable.
7. Dibuje una fórmula estructural completa y una fórmula estructural condensada para
 - (a) Tres compuestos con la fórmula $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$
 - (b) cinco compuestos con la fórmula $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$.

CAPÍTULO II. COMPUESTOS DEL CARBONO

2.1. ENLACE COVALENTE

Se denomina enlace covalente a la fuerza de unión entre átomos que se produce cuando dos o más átomos comparten uno o más pares de electrones. Esto sucede cuando los átomos se prestan electrones de su capa más externa, llamada capa de valencia, para adquirir una configuración electrónica más estable, similar a la del gas noble más cercano. Los enlaces covalentes pueden ser simples, dobles o triples, dependiendo de cuántos pares de electrones comparten los átomos.

Los enlaces covalentes son muy importantes en la química orgánica, donde la mayoría de los compuestos se unen mediante este tipo de enlace.

En la mayoría de los enlaces entre dos elementos distintos, los electrones de enlace por lo general son atraídos con mayor fuerza por uno de los dos núcleos. Un par de electrones de enlace compartido de manera desigual se conoce como enlace covalente polar.

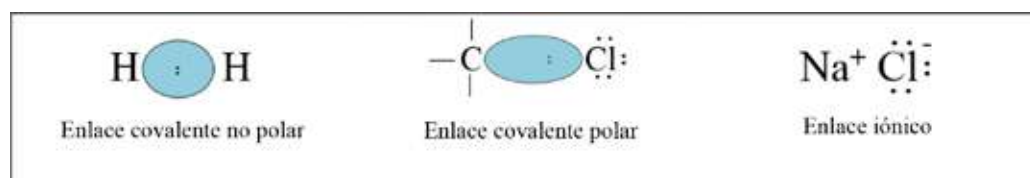


Figura 2.1. Representación gráfica del enlace covalente

Con frecuencia utilizamos las electronegatividades como una guía para predecir si un enlace dado será polar, así como la dirección de su momento dipolar. La escala de electronegatividad de Pauling, generalmente utilizada por los químicos orgánicos, se basa en las propiedades de enlace, y resulta útil para predecir la polaridad de los enlaces covalentes.

El enlace covalente es un tipo de unión química en la que uno o más pares de electrones se comparten entre dos átomos, generalmente no metálicos, con electronegatividades parecidas. Esto significa que ambos átomos ejercen una atracción similar sobre los electrones compartidos, evitando que uno de ellos domine en términos de atracción electrónica.

Cuando dos átomos forman un enlace covalente crean una molécula. La cantidad de electrones compartidos varía según las necesidades de cada átomo para completar su capa de valencia, que es la capa más externa de electrones. Por ejemplo, un átomo de hidrógeno, con un solo electrón en su capa de valencia necesita otro para alcanzar la estabilidad. Así, dos átomos de hidrógeno pueden compartir sus electrones, formando la molécula diatómica de hidrógeno (H_2).

Hay dos tipos principales de enlaces covalentes: los simples y los múltiples. Un enlace covalente simple ocurre cuando dos átomos comparten un solo par de electrones. En cambio, los enlaces covalentes múltiples implican la compartición de dos o más pares de electrones, como es el caso de los enlaces dobles (dos pares de electrones) o triples (tres pares de electrones). Estos enlaces múltiples permiten la formación de estructuras moleculares más complejas y con propiedades químicas únicas.

Finalmente se puede decir que los enlaces covalentes son un tipo frecuente de enlace químico, en el cual dos átomos comparten pares de electrones para formar una molécula.

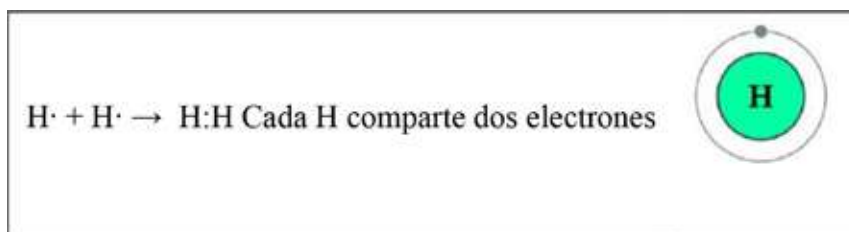


Figura 2.2. Enlace covalente de la molécula de hidrógeno

2.2. POLARIDAD DE ENLACES

En el ejemplo expresado anteriormente se puede ver que en la molécula de H_2 está enlazada por 2 átomos de hidrogeno completando así a regla del dueto y asemejándose a la configuración electrónica del gas noble más cercano que es el helio; además, ambos átomos comparten la misma electronegatividad por lo que se considera que el par de electrones se encuentra en el centro del enlace ya que están siendo atraídos de igual forma por ambos núcleos. En consecuencia, si considerásemos la molécula del cloro metano ($Cl-CH_3$) se denota la diferencia de electronegatividades entre sus átomos, puesto que los electrones son atraídos con mayor fuerza hacia el átomo de cloro, gráficamente se representa asignando el símbolo δ^- (carga parcial negativa) al Cl , y el símbolo δ^+ (carga parcial positiva) al C .

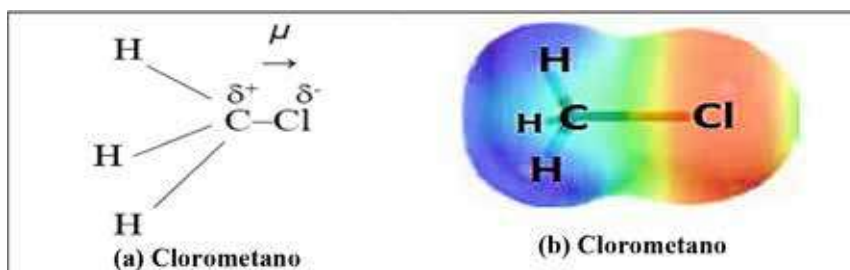


Figura 2.3. Estructura del cloro-metano (a) Fórmula estructural; (b) Fórmula espacial.

Fuente: Wade (2011)

2.2.1. Representación de potencial electrostático

Considerando así que la molécula de cloro metano es una molécula polar también denominada dipolo (presencia de 2 polos) y la molécula de H_2 presenta un enlace H-H no polar

En el gráfico se puede ver el potencial electrostático donde la región coloreada en rojo indica una carga parcial negativa en el átomo de cloro, mientras que

la región en azul representa las cargas parciales positivas presentes en los átomos de carbono e hidrógeno.

La electronegatividad es un parámetro fundamental para prever la polaridad de un enlace químico y la orientación del momento dipolar que resulta de dicho enlace. Los elementos con una electronegatividad más alta tienden a atraer con más fuerza los electrones compartidos en un enlace covalente. Por lo tanto, cuando dos átomos con electronegatividades distintas forman un enlace, el átomo con la electronegatividad más elevada adquiere una carga parcial negativa, convirtiéndose en el polo negativo del dipolo molecular.

Esta diferencia de carga entre los átomos conduce a la formación de un enlace covalente polar, con un átomo que actúa como un captador más eficiente de la densidad electrónica.

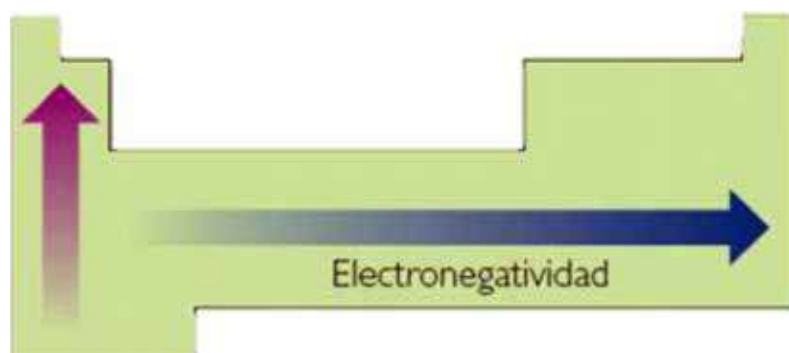


Figura 2.4. Aumento de electronegatividad en la tabla periódica

EJERCICIO

Con ayuda de las electronegatividades estime la dirección de los momentos dipolares de los enlaces que se muestran a continuación:

C—O	C—S	C—N
N—O	N—S	N—B

2.3. ESTABILIDAD, EFECTOS Y RESONANCIA

2.3.1. Estabilidad

La estabilidad de una molécula se refiere a la capacidad para mantener su estructura y resistirse a los cambios. Una molécula estable es aquella que es menos propensa a reaccionar o descomponerse en condiciones normales. La estabilidad de los compuestos orgánicos depende de diversos factores, como la naturaleza de los átomos que forman la molécula, la disposición espacial de los átomos, la presencia de grupos funcionales, la solubilidad, la temperatura, la presión y el pH del medio. Los compuestos orgánicos más estables son aquellos que presentan una estructura compacta y simétrica, así como enlaces fuertes y estables entre átomos. Además, los grupos funcionales que estabilizan la carga eléctrica o aumentan la densidad electrónica en la molécula también pueden contribuir a su estabilidad.

Por otro lado, los compuestos orgánicos inestables son aquellos con enlaces débiles, grupos funcionales reactivos, átomos o estructuras inestables. Estos compuestos pueden sufrir reacciones químicas espontáneas o ser inestables bajo ciertas condiciones ambientales, como altas temperaturas, exposición a la luz o a ciertos productos químicos.

2.3.1.1. Factores que pueden afectar la estabilidad de los compuestos orgánicos

- Presencia de grupos funcionales que puedan interactuar de manera desfavorable, como grupos ácido y base en la misma molécula, lo que puede dar lugar a reacciones de neutralización o hidrólisis.
- Presencia de grupos funcionales que puedan oxidarse o reducirse, como los grupos aldehído y cetona, que pueden ser reducidos a alcoholes u oxidados a ácidos carboxílicos.
- Presencia de enlaces dobles o triples en la molécula, que pueden ser más susceptibles a la reacción que los enlaces simples debido a la mayor polaridad y reactividad asociada con los enlaces múltiples.

- Presencia de grupos funcionales que puedan interactuar con otros grupos en la misma molécula o en moléculas cercanas, como la presencia de grupos amino y carboxilo en la misma molécula, lo que puede dar lugar a la formación de enlaces peptídicos.
- La temperatura, el pH y la concentración de los reactivos en la solución también pueden influir en la estabilidad de los compuestos orgánicos.

La estabilidad de los compuestos orgánicos tiene un impacto directo en procesos como la síntesis, el almacenamiento y la manipulación de dichos compuestos. Esta relevancia se extiende a diversos sectores, incluyendo la industria farmacéutica, la agroquímica y la tecnología de materiales.

La estabilidad química de una sustancia hace referencia a su aptitud para preservar su estructura y propiedades químicas intactas frente a factores ambientales externos como cambios en la temperatura, presión, exposición a la luz y la presencia de agentes químicos reactivos. Dicha estabilidad es crucial en industrias como la química, la farmacéutica y la alimentaria, en las que las sustancias deben mantener su integridad durante el almacenamiento, el transporte y la utilización para garantizar su calidad y efectividad.

La estabilidad de una sustancia también está influenciada por factores intrínsecos, como su estructura molecular, la polaridad de sus componentes y su capacidad para formar interacciones con otros compuestos. Estas características intramoleculares pueden afectar la reactividad de la sustancia y, por tanto, su estabilidad bajo distintas condiciones.

Por ejemplo, las sustancias químicas que son más reactivas, más polarizables o más susceptibles a la oxidación pueden ser menos estables y pueden requerir condiciones especiales de almacenamiento o manipulación para evitar su descomposición o degradación.

En general, la estabilidad química es esencial para garantizar la calidad y la seguridad de las sustancias químicas utilizadas en diversas industrias. Los científicos y técnicos dedicados a la química deben tener un conocimiento profundo de los factores que influyen en la estabilidad de las sustancias químicas y las técnicas para evaluarla y mantenerla.

Estabilidad química: esta propiedad determina si un elemento o compuesto químico tiene la tendencia a reaccionar de manera espontánea o se descompone al entrar en contacto con otro elemento. Alternativamente, indica si requiere una intervención externa para desencadenar la reacción.

Estabilidad de carbocationes: los carbocationes no saturados también son estabilizados mediante la estabilización por resonancia. Si un enlace pi (π) es adyacente a un carbocatión, los orbitales p llenos del enlace (π) se traslaparán con el orbital p vacío del carbocatión. El resultado es un ion deslocalizado, con la carga positiva compartida entre dos átomos. La deslocalización por resonancia es muy efectiva para estabilizar a las carbonaciones.

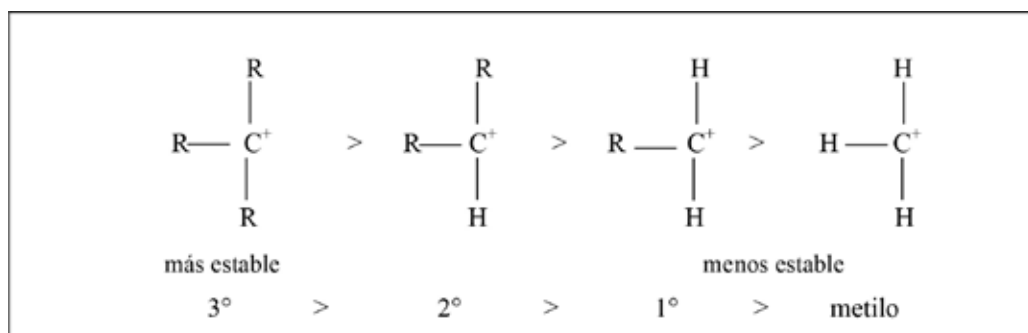


Figura 2.5. Orden de estabilidad de los carbocationes

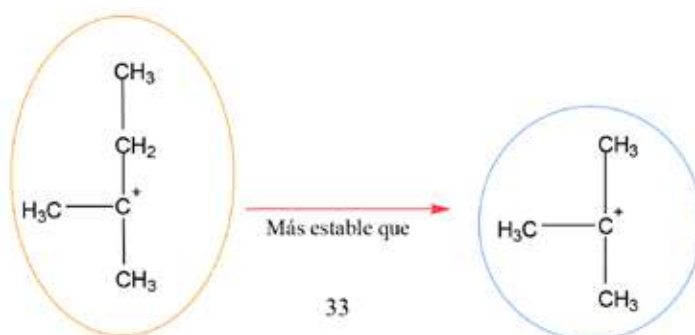


Figura 2.6. El isopentilo es más estable que el isobutilo



Figura 2.7. El isohexilo es más estable que el isobutilo

Grupos inductores: Los grupos alquilo son inductores de electrones, es decir, tienden a donar densidad electrónica hacia el carbono cargado positivamente (carbocatión). Este efecto de donación de electrones disminuye la densidad de carga positiva en el carbocatión, estabilizándolo.

El efecto inductivo positivo de los grupos alquilo es acumulativo, lo que significa que mientras más grupos alquilo estén unidos al carbono cargado positivamente, mayor será la estabilización del carbocatión.

Grupos resonantes:

Los grupos resonantes, como los anillos aromáticos y ciertos átomos halógenos, pueden estabilizar un carbocatión a través de la deslocalización de la carga positiva. Por ejemplo, en el caso del benceno, un anillo aromático puede participar en la resonancia, compartiendo la carga positiva entre varios átomos, lo que reduce la densidad de carga en el carbono original.

Los átomos halógenos, aunque electronegativos, pueden también estabilizar carbocationes a través de la deslocalización de la carga positiva por resonancia si están en posiciones adecuadas respecto al carbono cargado.

Efectos inductores y resonantes: Se debe clarificar que, aunque ambos efectos estabilizan carbocationes, operan a través de mecanismos diferentes. El efecto

inductor es un fenómeno puramente electrostático, mientras que el efecto resonante implica una redistribución de la densidad electrónica a través de un sistema π .

2.3.2. Efectos

Son aquellos cambios en las propiedades de una molécula que se deben a la presencia de grupos funcionales o átomos específicos en su estructura. Los efectos pueden ser electrónicos o estéricos y pueden influir en la reactividad y estabilidad de la molécula.

2.3.2.1. Efectos electrónicos

Los efectos electrónicos son fenómenos asociados con la polarización de los enlaces covalentes y la distribución de los electrones en una molécula. Estos efectos son críticos para comprender la reactividad y la estabilidad de los compuestos orgánicos y pueden manifestarse de diversas maneras, tales como:

- Efecto Inductivo: es la polarización de un enlace covalente que ocurre en una molécula debido a la influencia de átomos electronegativos o grupos que tienen una alta afinidad por los electrones cercanos al enlace. Esto puede llevar a una distribución desigual de la carga eléctrica a lo largo de la cadena de átomos, lo que a su vez puede alterar la reactividad de los grupos funcionales adyacentes.
- Efecto de Resonancia: se relaciona con la deslocalización de electrones en una molécula, que resulta de la combinación de dos o más estructuras de Lewis (también conocidas como formas resonantes o estructuras resonantes) que son equivalentes en energía. Este efecto contribuye a la estabilización de la molécula, al permitir que los electrones se distribuyan sobre un conjunto de átomos, reduciendo potencialmente su reactividad.
- Efecto de Mesomería: a menudo considerado sinónimo del efecto de resonancia. El efecto de mesomería hace referencia a la distribución de

electrones en una molécula a través de la superposición de estructuras resonantes no equivalentes. Este fenómeno puede tener un impacto significativo sobre la reactividad y la estabilidad molecular, debido a que permite una diseminación de carga a través de diferentes configuraciones electrónicas.

Estos efectos electrónicos son fundamentales para la química orgánica, pues proporcionan una explicación detallada de cómo las diferencias en la electronegatividad y la estructura molecular pueden influir en las propiedades químicas de las moléculas.

2.3.2.2. Efectos estéricos

Son aquellos que alteran la disposición espacial de los átomos en una molécula y pueden afectar la reactividad debido a la interferencia con otros grupos funcionales. Algunos ejemplos de efectos estéricos incluyen:

- Efecto estérico repulsivo: describe a la repulsión entre dos grupos funcionales o átomos en una molécula debido a su proximidad espacial.
- Efecto estérico de bloqueo: describe la obstrucción de un grupo funcional o átomo en una molécula debido a la presencia de otros grupos funcionales cercanos.

Los efectos son una parte fundamental de la química orgánica y son importantes para comprender la reactividad y la estabilidad de las moléculas. Los efectos se utilizan en la síntesis y el diseño de nuevos compuestos orgánicos para lograr objetivos específicos, como la mejora de la selectividad o la actividad biológica.

2.3.3. Resonancia

La resonancia es un concepto fundamental en la química orgánica que se emplea para explicar cómo se distribuyen los electrones dentro de una molécula. En las moléculas orgánicas, los átomos de carbono y otros átomos pueden unirse mediante enlaces covalentes dobles o triples, lo que implica que comparten dos o tres pares de electrones, respectivamente. Cuando una molécula tiene enlaces múltiples, la distribución de los electrones puede resultar ambigua y difícil de representar con una sola estructura de Lewis.

En lugar de depender de una sola estructura de Lewis, se recurre a varias estructuras de resonancia para explicar la distribución electrónica en aquellas moléculas que no pueden representarse adecuadamente con una única estructura. Estas diferentes representaciones se conocen como estructuras de resonancia o formas resonantes. En las estructuras de resonancia, los electrones se desplazan entre los átomos de la molécula, generando una distribución electrónica más estable que la que ofrecen las estructuras de Lewis individuales. En una molécula con resonancia, los enlaces no son estrictamente simples ni dobles, sino que se comparten parcialmente entre los átomos de la molécula.

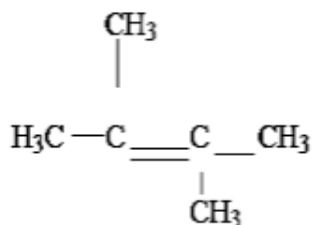
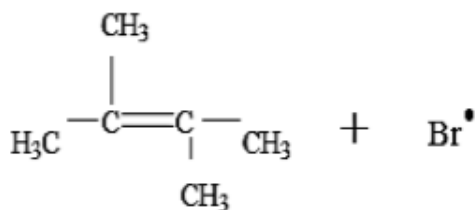
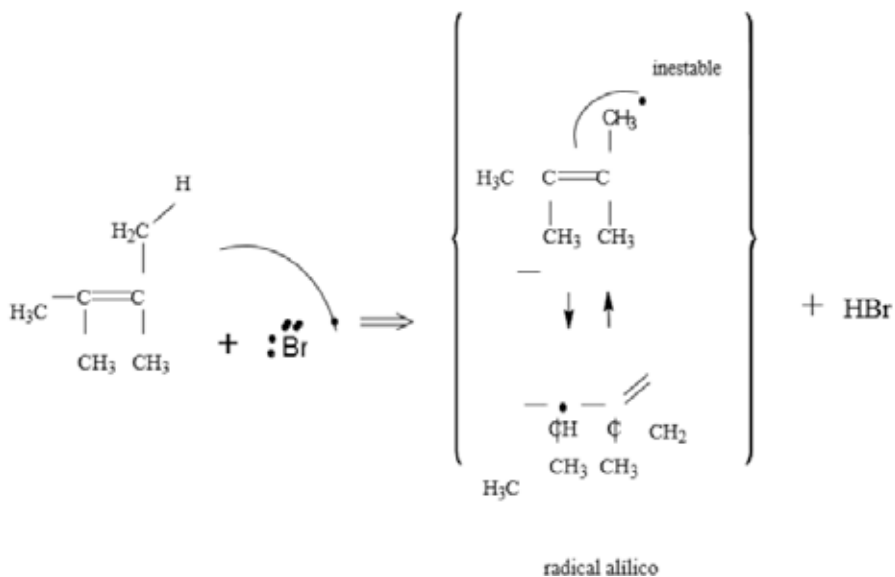
La resonancia describe la deslocalización de electrones en ciertas moléculas o iones donde más de una estructura de Lewis puede ser dibujada para representar la distribución de los electrones. Es importante enfatizar que las estructuras resonantes, también llamadas estructuras canónicas, no representan estados individuales o separados de la molécula, sino que son una herramienta teórica que ayuda. En realidad, la molécula no oscila entre estas estructuras canónicas; en su lugar, la verdadera estructura es un híbrido resonante, que es más estable que cualquiera de las estructuras canónicas por separado. Este híbrido resonante refleja la deslocalización de los electrones, distribuyendo la carga de manera más uniforme a través de la molécula.

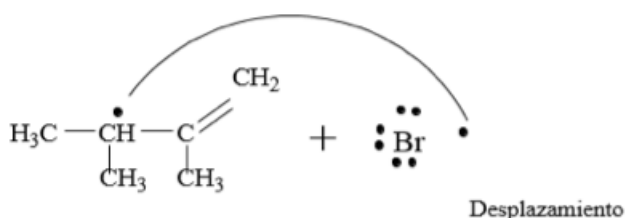
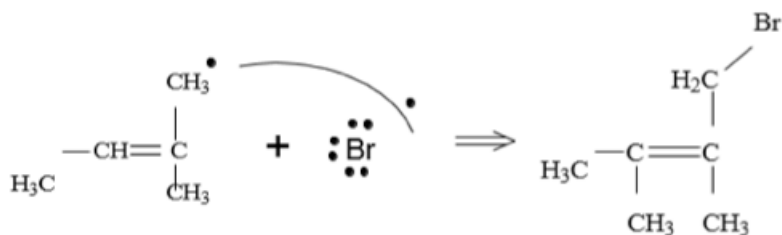
La resonancia es importante en química orgánica, debido que incide en la reactividad y estabilidad de las moléculas. Las moléculas con resonancia son más estables que aquellas sin ella, dado que la distribución de electrones es más uniforme en toda la molécula. Además, la resonancia influye en la reactividad de las moléculas, ya que los electrones móviles de las estructuras de resonancia determinan la forma en que la molécula reacciona con otros compuestos.

Ejemplo:

Deslocalización de los electrones pi y electrones libres en una molécula.

- 2-3 dimetil But-2-eno

**Paso 1:** Iniciación**Paso 2:** Propagación

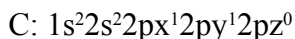
Paso 3: Terminación**2.4. HIBRIDACIÓN E ISOMERÍA****2.4.1. Hibridación**

Los átomos de carbono tienen la notable capacidad de enlazarse entre sí, formando cadenas y estructuras complejas. Esta habilidad única del carbono es fundamental para la existencia de la vida tal como la conocemos. La razón detrás de esta capacidad se encuentra en la configuración electrónica del átomo de carbono.

Siguiendo las reglas de llenado de los orbitales atómicos, que organizan los electrones desde los niveles de menor energía hacia los de mayor energía, la configuración electrónica del átomo de carbono es la siguiente: $1s^2 2s^2 2p^2$. Esta configuración permite que al carbono se formen cuatro enlaces covalentes, faci-

litando la creación de una gran variedad de moléculas orgánicas esenciales para la vida.

Los suborbitales **p** son tres, tienen igual energía, pero diferente orientación espacial: son mutuamente perpendiculares. Teniendo esto en cuenta, la configuración electrónica del átomo de C queda:



Cuando el átomo de C forma enlaces, combina orbitales de energía similar, dando lugar a nuevos orbitales. Esa combinación se denomina hibridación de orbitales, por esta razón el átomo de carbono se puede unir a 3 o 4 átomos y no solo a 2 al detener 2 electrones desapareados.

Una de las reglas fundamentales de la hibridación indica que se forman tantos orbitales híbridos como orbitales atómicos se combinan originalmente. Los orbitales híbridos resultantes poseen la misma energía, es decir, son equivalentes entre sí.

La otra regla importante que rige el llenado de estos orbitales híbridos establece que los electrones se distribuyan de manera que maximice el número de electrones desapareados. Esta distribución favorece la formación de enlaces y la estabilidad de la molécula resultante.

Hay tres hibridaciones posibles: sp^3 , sp^2 y sp .

2.4.1.1. Hibridación sp^3

Se combinan los orbitales 2s, 2p_x, 2p_y y 2p_z con lo cual se obtienen 4 orbitales híbridos constituidos por 1 parte de orbital s y 3 partes de orbitales p (por ese motivo los llamamos sp^3). Este tipo de hibridación se observa en moléculas como el metano (CH₄) donde el carbono está unido a 4 átomos.

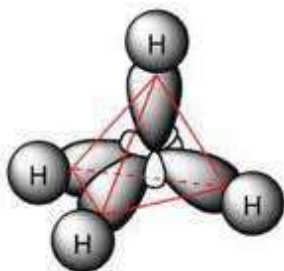


Figura 2.8. Representación espacial de la molécula de metano

Fuente: Wade (2011)

2.4.1.2. Hibridación sp^2

Se combinan el orbital $2s$ y dos orbitales $2p$, obteniendo tres orbitales híbridos, $2s$, $2p_x$ y $2p_y$, y nos queda el orbital $2p_z$ sin combinar. Un ejemplo de hibridación sp^2 es el carbono en el etileno (C_2H_4)

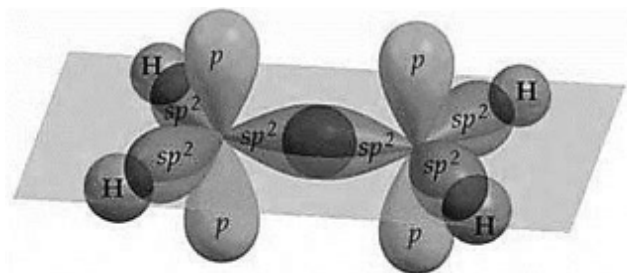


Figura 2.9. Representación espacial del eteno.

Fuente: Wade (2011)

2.4.1.3. Hibridación sp

Se combinan los orbitales 2s y 2p_x, con lo cual se obtienen 2 orbitales híbridos constituidos por 1 parte de orbital s y 1 parte de orbitales p, quedando los orbitales 2p_y y 2p_z sin combinar. Un ejemplo de hibridación sp es el carbono en el acetileno (C₂H₂).

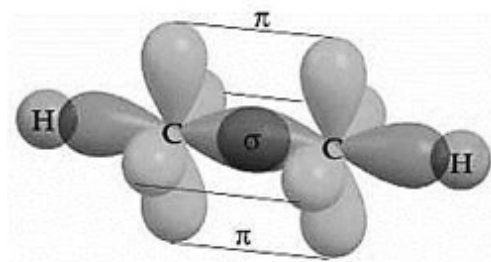


Figura 2.10. Representación espacial del etino

Fuente: Wade (2011)

2.4.2. Isomería

La isomería es la propiedad que tienen dos o más compuestos químicos de tener la misma fórmula molecular pero diferentes estructuras y propiedades físicas y químicas, por ejemplo los isómeros lineales suelen tener puntos de ebullición y fusión más altos que sus isómeros ramificados, debido a que las cadenas rectas permiten un mayor contacto intermolecular (más fuerzas de Van der Waals), en las propiedades químicas encontramos que los enantiómeros pueden interactuar de manera diferente con otros compuestos quirales, como en el caso de los sistemas biológicos (ej. un enantiómero de un fármaco puede ser activo y el otro inactivo). El término Isómeros viene (del griego isos-meros: igual forma).

Ejemplo:**Butano e isobutano** (isómeros de cadena):

- Físicas: El butano (lineal) tiene un punto de ebullición más alto que el isobutano (ramificado).
- Químicas: Ambas moléculas reaccionan de manera similar en la combustión, pero el isobutano puede ser ligeramente menos reactivo en algunas reacciones de sustitución debido a su mayor impedimento estérico.

2.4.2.1. Clasificación

Se clasifica en dos tipos: isomería constitucional o plana e isomería configuracional o estereoisomería.

2.4.2.1.1. Isomería constitucional

Se refiere a los compuestos que tienen la misma fórmula molecular, pero difieren en su estructura. Se divide en cuatro clases: isomería de cadena, isomería de posición, isomería de función y tautomería.

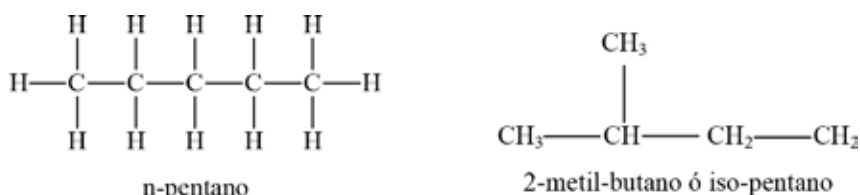


Figura 2.11. Ejemplos de isomería de cadena

- La isomería de cadena se produce cuando los isómeros tienen la misma fórmula molecular, pero difieren en el orden en que se unen los átomos de carbono en las cadenas carbonadas respectivas. Ejemplo: pentano-isopentano

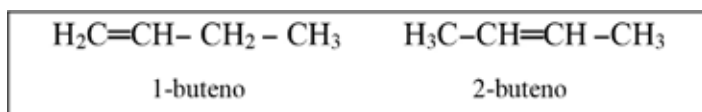


Figura 2.12. Ejemplos de isomería de posición

- La isomería de posición se produce cuando los isómeros tienen la misma cadena, pero se diferencian en el lugar de la misma en que contienen un mismo grupo funcional o sustituyente, o bien un enlace doble o triple. Ejemplo: 1-buteno-2-buteno

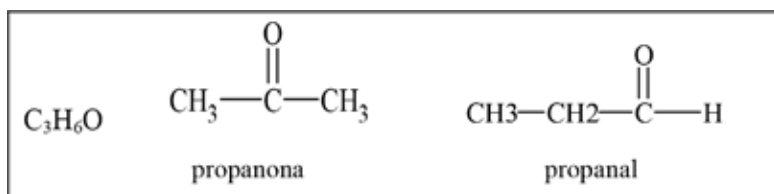


Figura 2.13. Ejemplos de isomería de función

- La isomería de función se produce cuando los isómeros tienen la misma cadena y los mismos elementos funcionales, pero difieren en el tipo de grupo funcional que presentan. Ejemplo: Propanona-propanal.

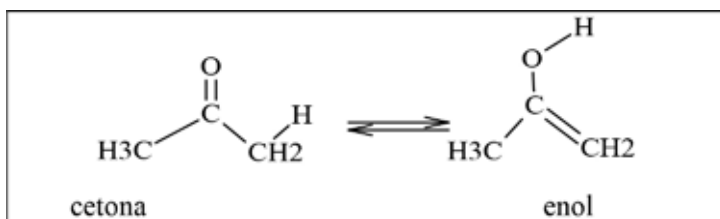


Figura 2.14. Ejemplos de tautomería

- La tautomería es una relación entre isómeros que están en equilibrio y se interconvierten continuamente. Ejemplo: cetona-enol

2.4.2.1.2. Isomería configuracional:

Se refiere a los compuestos que tienen la misma fórmula molecular y la misma estructura, pero difieren en la disposición espacial de sus átomos. Se divide en dos clases: isomería geométrica e isomería óptica.

- La isomería geométrica se produce cuando los isómeros tienen la misma estructura, pero difieren en la posición relativa de los átomos en el espacio. Ejemplo: cis-2-buteno - trans-2-buteno

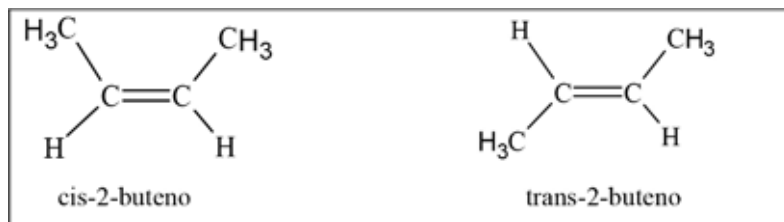


Figura 2.15. Ejemplos isomería geométrica

- La isomería óptica se produce cuando los isómeros tienen la misma estructura y posición relativa de los átomos en el espacio, pero difieren en su capacidad para desviar la luz polarizada.

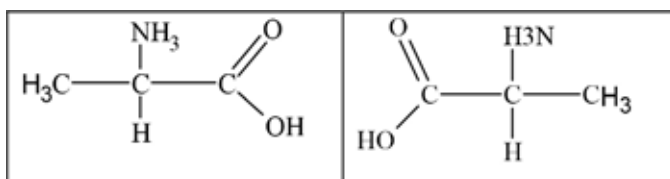


Figura 2.16. Ejemplos isomería óptica

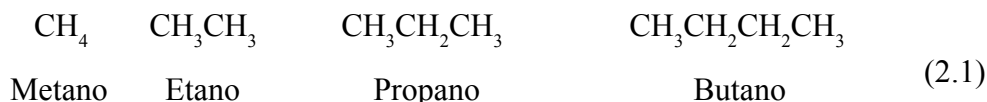
2.5. GRUPOS FUNCIONALES, CLASIFICACIÓN

2.5.1. Alcanos

2.5.1.1. Estructura y nomenclatura

Los alcanos son componentes que albergan átomos de carbono hibridados (sp^3). La fórmula de los alcanos es la siguiente: C_nH_{2n+2} . Esto quiere decir que comprenden la máxima proporción de átomos de hidrógeno que corresponden para un número considerado de átomos de carbono; y es principalmente por esta razón que se los nombra como saturados. En su estructura presentan únicamente enlaces sigma o también llamados enlaces simples como: C-H y C-C. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

Autino, en su libro de química orgánica, menciona que el metano es el alcano más sencillo de entre toda la gama de alcanos disponibles. La familia de los alcanos más simples o normales consta de cuatro miembros, estos son los siguientes: (Autino, Romanelli, y Ruiz, 2013)



2.5.2. Generalidades de los alcanos

Como dato curioso, en su trabajo de titulación de Hernández menciona que, en la Arqueología, el compuesto más utilizado es el alcano, a diferencia de otros compuestos como ácidos alcanoicos y los alcoholes. Por otro lado, los compuestos llamados triterpenoides pentacíclicos son usados con regularidad para caracterizar los orígenes de materia orgánica que se ha sedimentado, puesto que son componentes comunes en las plantas catalogadas como superiores. Hernández también menciona que estos grupos funcionales son los que mayormente se determinan puesto que son los que tienen muy bajo nivel de degradación. Especialmente encontramos que se derivan de ceras epicuticulares de una gama de especies vegetales; es pertinente mencionar que existen especies vegetales que en su estructura presentan un determinado número de n-alcanos; esto quiere decir que son muy fáciles de identificarse presentan n-alcanos de cadena muy larga, es decir, cadenas que cuenten con 27, 29 y hasta 31 átomos de carbono. (Hernández, 2018; Wade, 2011)

2.5.3. Propiedades físicas de los alcanos

2.5.3.1. Punto de ebullición de los alcanos

Como se puede observar en la siguiente tabla, los puntos de ebullición van aumentando de poco en poco conforme incrementa el número de átomos de carbono y a medida que también incrementan las masas moleculares. Las moléculas de mayor tamaño tienen áreas superficiales mucho más grandes, con mayor atracción de fuerzas de Van der Waals y área superficial, van a tener una temperatura de ebullición mucho más incrementada. (Wade, 2011)

Los puntos de ebullición incrementan cuando se aumenta la masa molecular. Cada uno de los grupos CH₂ extra incrementa el punto de ebullición en un aproximado de 30°C en casi los alcanos que cuentan hasta con diez carbonos, y en aproximadamente de 20°C en los alcanos con mayor cantidad de carbonos. Wade (2011)

Tabla 2.1. Fórmulas y propiedades físicas de los alcanos no ramificados, llamados n-alcanos

Alcano	Nº de carbonos	Estructura	Fórmula	Pe (°C)	Pf (°C)	Densidad
Metano	1	H-CH ₂ -H	CH ₄	-164	-183	0,55
Etano	2	H-(CH ₂) ₂ -H	C ₂ H ₆	-89	-183	0,51
Propano	3	H-(CH ₂) ₃ -H	C ₃ H ₈	-42	-189	0,50
Butano	4	H-(CH ₂) ₄ -H	C ₄ H ₁₀	0	-138	0,58
Pentano	5	H-(CH ₂) ₅ -H	C ₅ H ₁₂	36	-130	0,63
Hexano	6	H-(CH ₂) ₆ -H	C ₆ H ₁₄	69	-95	0,66
Heptano	7	H-(CH ₂) ₇ -H	C ₇ H ₁₆	98	-91	0,68
Octano	8	H-(CH ₂) ₈ -H	C ₈ H ₁₈	126	-57	0,70
Nonano	9	H-(CH ₂) ₉ -H	C ₉ H ₂₀	151	-51	0,72
Decano	10	H-(CH ₂) ₁₀ -H	C ₁₀ H ₂₂	174	-30	0,73
Undecano	11	H-(CH ₂) ₁₁ -H	C ₁₁ H ₂₄	196	-26	0,74
Doecano	12	H-(CH ₂) ₁₂ -H	C ₁₂ H ₂₆	216	-10	0,75
Tridecano	13	H-(CH ₂) ₁₃ -H	C ₁₃ H ₂₈	235	-5	0,76
Tetradecano	14	H-(CH ₂) ₁₄ -H	C ₁₄ H ₃₀	254	6	0,76
Pentadecano	15	H-(CH ₂) ₁₅ -H	C ₁₅ H ₃₂	271	10	0,77
Hexadecano	16	H-(CH ₂) ₁₆ -H	C ₁₆ H ₃₄	287	18	0,77
Heptadecano	17	H-(CH ₂) ₁₇ -H	C ₁₇ H ₃₆	303	23	0,76
Octadecano	18	H-(CH ₂) ₁₈ -H	C ₁₈ H ₃₈	317	28	0,76
Nonadecano	19	H-(CH ₂) ₁₉ -H	C ₁₉ H ₄₀	330	32	0,78
Eicosano	20	H-(CH ₂) ₂₀ -H	C ₂₀ H ₄₂	343	37	0,79
Triacontano	30	H-(CH ₂) ₃₀ -H	C ₃₀ H ₆₂	>450	66	0,81
* Observaciones: Pf = Punto de fusión; Pe = Punto de ebullición.						

2.6. PUNTOS DE FUSIÓN DE LOS ALCANOS

Los puntos de fusión, así como suceden con los puntos de ebullición también van a aumentar a medida que también aumenta la masa molecular. Aquellos alcanos que tienen en su estructura un número par de átomos de carbono son más concisos; es decir, se compactan de mejor manera en estructuras sólidas: esto quiere decir que para poder fundirlos se va a requerir temperaturas mucho más altas. Los alcanos con números impares de átomos de carbono tienen dificultad a la hora de compactarse, por lo que a la hora de fundirse lo hacen con mayor facilidad y a temperaturas más bajas. (Wade, 2011).

La ramificación de las cadenas repercute en el punto de fusión de los alcanos. Por ejemplo, un alcano ramificado que contiene el mismo número de átomos de carbono que un n-alcano funde a una temperatura un poco más avanzada. La ramificación perteneciente a un alcano le brinda una estructuración de forma tri-dimensional mucho más compacta, lo cual facilita la cohesión y de esta manera formar una estructura sólida e incrementar el punto de Wade (2011)

2.7. MECANISMO DE REACCIÓN

2.7.1. Reacción de Craqueo e hidro craqueo

A temperaturas altas, el **craqueo catalítico** de hidrocarburos de cadena larga va a generar hidrocarburos de pequeño tamaño. Los pasos para realizar esta reacción se lo realizan en condiciones que dan lugar a rendimientos altos de la gasolina. Por otra parte, en el **hidro craqueo**, se añade una molécula de hidrógeno para dar lugar a hidrocarburos saturados. El craqueo sin molécula de hidrógeno da como producto mezclas tanto de alcanos como de alquenos, como se observan en las siguientes figuras.

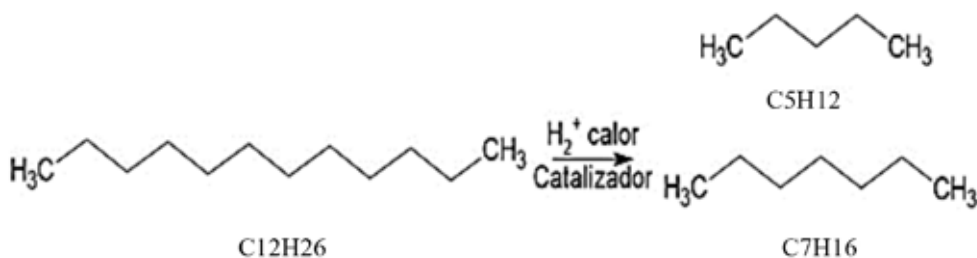


Figura 2.17. Hidrocraqueo catalítico

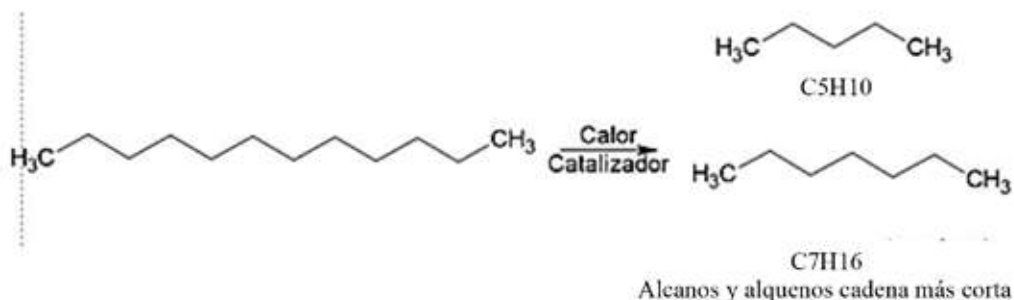


Figura 2.18. Craqueo catalítico

2.8. ALQUENOS

Los alquenos son hidrocarburos insaturados. Las moléculas de estos hidrocarburos engloban dobles enlaces de carbono-carbono. Muy a diferencia de los alcanos, el enlace doble perteneciente de los alquenos es reactivo; y esta característica le ayuda a determinar las propiedades que pertenecen a este. Los alquenos que tienen en sus moléculas enlaces doble de carbono-carbono se cimienta a partir de esta fórmula generalizada C_nH_{2n} ; esto quiere decir que son isómeros de cicloalcanos. A continuación, se presenta un ejemplo el 1-buteno es isómero del ciclobutano (C_4H_8).

El alqueno más sencillo que se conoce es el eteno, también conocido con su nombre trivial etileno. La fórmula de este alqueno es C_2H_4 y posee en su estructura un doble enlace. La distancia del enlace $C=C$ es de $1,33 \text{ \AA}$ en el etileno, es decir, mucho más pequeño que el enlace simple $C-C$ que corresponde al etano que posee $1,54 \text{ \AA}$. Los ángulos de enlace en $H-C-H$ y $C-C-H$ es de $116,6^\circ$ y $121,7^\circ$ respectivamente. Estos ángulos y distancias de enlace se pueden aclarar aceptando que, estos dos átomos de carbono que se encuentran conformando el enlace doble, presentan una hibridación sp^2 , con el doble enlace conformado por un enlace pi y uno sigma, y que el carbono es más voluptuoso que los átomos de hidrógeno (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013), como se puede observar en los siguientes ejemplos.

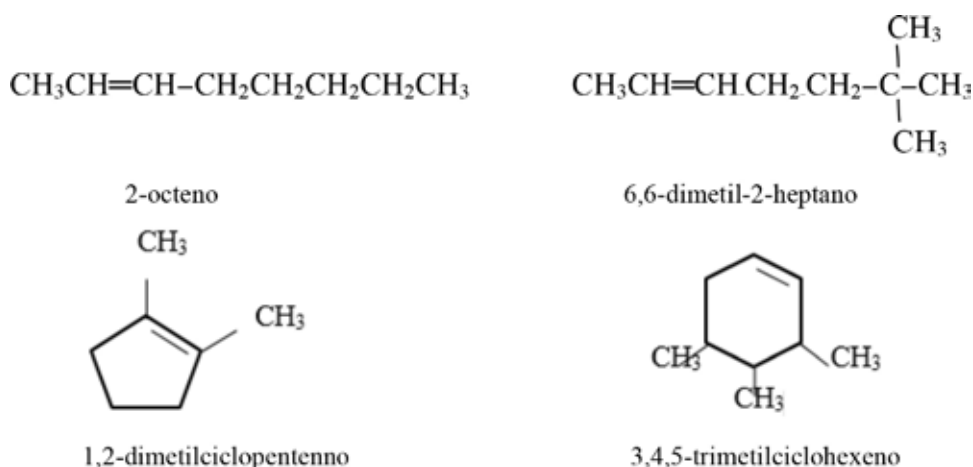


Figura 2.19. Compuestos que presentan hibridación sp^2

2.8.1. Importancia comercial de los alquenos

Puesto que el enlace doble carbono-carbono se transforma muy fácilmente en demás grupos funcionales de gran relevancia, los alquenos son mediadores muy relevantes en la síntesis de medicamentos, pesticidas, polímeros y otros productos químicos muy relevantes. (Wade, 2011)

El compuesto orgánico de mayor relevancia y que se produce en mayor volumen es el etileno; se llega a producir en un aproximado de 160 mil millones de libras al año, y esto a nivel global. Del etileno se adquiere el polietileno; es así que se polimeriza la mayor cantidad de etileno para poder desarrollar 90 mil millones de libras de este compuesto llamado polietileno. (Wade, 2011)



Figura 2.20. Cloruro de vinilo

2.8.2. Propiedades físicas de los alquenos

La mayor cantidad de propiedades físicas del grupo funcional de alquenos son similares a las de los alcanos. Como, por ejemplo: los puntos de ebullición se aproximan a los 0°C. En cuanto a la densidad, el valor aproximadamente es de 0,6 o 0,7 g/cm³. Los puntos de ebullición de los alquenos se incrementan muy ligeramente con la masa molecular. En similitud que los alcanos, cuando existe una ramificación extensa significan que hay puntos de ebullición muy bajos y

existe más volatilidad. Un ejemplo muy claro es el 2- metilpropeno o también llamado isobutileno, el cual tiene un punto de ebullición de -7°C . Este valor es más bajo que el punto de ebullición de variedades de buteno que no son ramificados. (Wade, 2011)

2.9. POLARIDAD

Los alquenos son no polares. Son muy solubles en disolvente que no son polares como, por ejemplo: éteres, disolventes halogenados, gasolina y hexano, pero con insolubles en agua. Existen dos razones por la que los alquenos con más polares que los alcanos: los enlaces vinílicos se inclinan a ser un poco polares y también por la debilidad de retener a electrones del enlace “pi”, es ahí cuando son más polarizables. (Wade, 2011)

2.10. Mecanismo de reacción

2.10.1. Mecanismo de hidrobtoración de un alqueno

El borano es un componente falto en densidad electrónica. Tiene solo seis electrones de valencia, puesto que el boro presente en el BH_3 no puede poseer un octeto. Tener un octeto es la fuerza que dirige a las estructuras de enlaces inusuales que vemos en los compuestos de boro. Como un compuesto falto de densidad electrónica. El BH_3 tiene la característica de un electrófilo fuerte, con capacidad de sumarse un enlace doble.

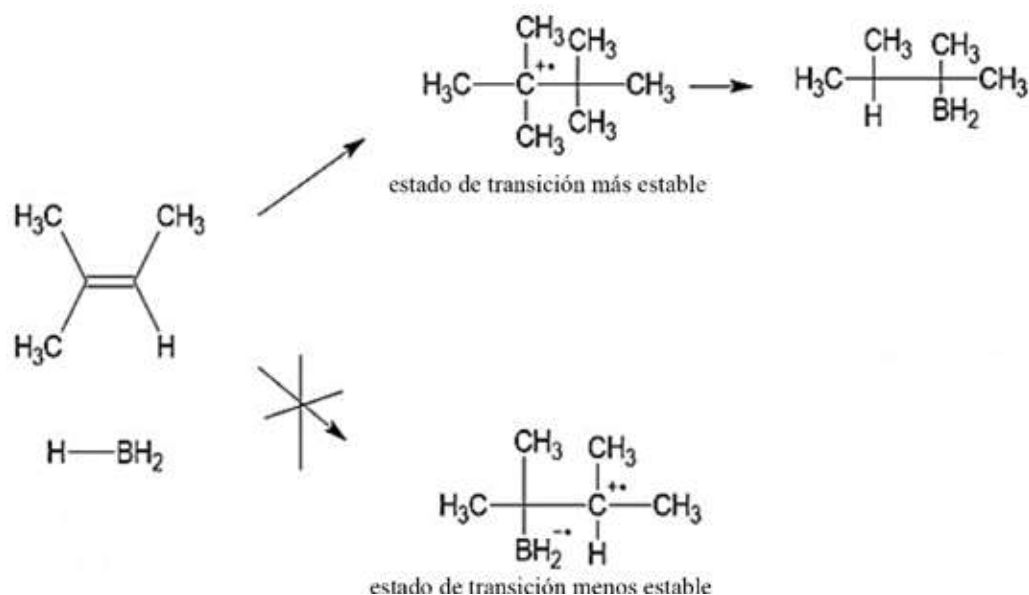


Figura 2.21. Mecanismo de hidroboración de un alqueno

2.11. ALQUINOS

2.11.1. Estructura y nomenclatura

Los alquinos son otro tipo de hidrocarburos insaturados; las moléculas que los estructuran están conformadas por enlaces triples carbono-carbono. A diferencia de los alcanos, el enlace variable de los alquinos (muy a diferencia de lo que en los alquenos) es reactivo y de esto va a dar las características a sus propiedades. La fórmula generalizada de estos grupos funcionales es $\text{C}_n\text{H}_{2n-2}$. Se los cataloga como acetileno, ya que son considerados como procedentes del alquino más común, cuyo nombre es acetileno.



Acetileno o etileno

El etino es una estructura de manera lineal, esto por una hibridación sp para cada átomo de carbono. La superposición de 2 de los orbitales sp da como resultado el enlace σ C-C, y la superposición del orbital de hidrógeno con el orbital s da como resultado el enlace σ C-H. El origen de los dos enlaces π resulta de la combinación de 2 pares de los orbitales p que están en paralelo. 1,20 Å es la longitud que corresponde al enlace C-C en el acetileno; mientras que 1,06 Å es la longitud que corresponde a los enlaces C-H en el acetileno. Los dos enlaces, tanto el C-H como el C-C, son cortos en comparación de los enlaces pertenecientes al eteno y al etano. La clasificación de los alquinos viene dada en dos grupos de mucha relevancia: alquinos internos (o también llamados no terminales) y los alquinos terminales. Aquí va a depender mucho dónde está ubicado los carbonos sp dentro de la estructura de la cadena. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

2.11.2. Propiedades físicas de los alquinos

Así como las propiedades físicas de alcanos y alquenos son similares, con los alquinos no era la excepción; cómo podemos apreciar en la tabla 2.2, los alquinos son casi insolubles en agua. Lo que sí son muy solubles es, en una gran gama de disolventes orgánicos como: alcoholes, cloroformo, cloruro de metilo, éter y acetona. Los alquinos tienen la particularidad de poseer un olor característico, es decir, un olor un tanto desagradable. El propino y acetileno son alquinos cuya particularidad es estar en forma de gas a temperatura ambiente, al igual que los alquenos y alcanos. Incluso hay semejanza en el punto de ebullición, ya que tanto, alquenos y alquinos poseen esqueletos de carbono muy insaturados. (Wade, 2011)

Tabla 2.2. Propiedades físicas de alquinos seleccionados

Nombre	Estructura	Pf (°C)	Pe (°C)	Densidad (g/cm ³)
Etino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	-82	-84	0,62
Propino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_3$	-101	-23	0,67
But-1-ino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_3$	-126	8	0,67
But-2-ino	$\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_3$	-32	27	0,69
Pent-1-ino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	-90	40	0,70
Pent-2-ino	$\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_3$	-101	55	0,71
3-metilbt-1-ino	$\text{CH}_3-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$		28	0,67
Hex-1-ino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-(\text{CH}_2)_3-\text{CH}_3$	-132	71	0,72
Hex-2-ino	$\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	-90	84	0,73
Hex-3-ino	$\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_3$	-101	82	0,73
3,3-dimetilbut-1-ino	$(\text{CH}_3)_3\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	-81	38	0,67
Hept-1-ino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$	-81	100	0,73
Oct-1-ino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-(\text{CH}_2)_5\text{CH}_3$	-79	125	0,75
Non-1-ino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-(\text{CH}_2)_6\text{CH}_3$	-50	151	0,76
Dec-1-ino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3$	-36	174	0,77
* Observaciones: Pf = Punto de fusión; Pe = Punto de ebullición.				

2.11.3. Importancia comercial de los alquinos Usos del acetileno y del metilacetileno

El alquino conocido como el más relevante en cuanto al comercio es el **acetileno**, porque es una de las materias primas más importantes. El aprovechamiento de ésta es como combustibles de sopletes, ya sea de oxígeno o acetileno. La particularidad de este tipo de gas es ser de un olor muy repelente al olfato humano además de ser un gas incoloro; cuando está en contacto con el aire tiende a tornarse como una flama de color amarillo negruzco. Wade (2011)



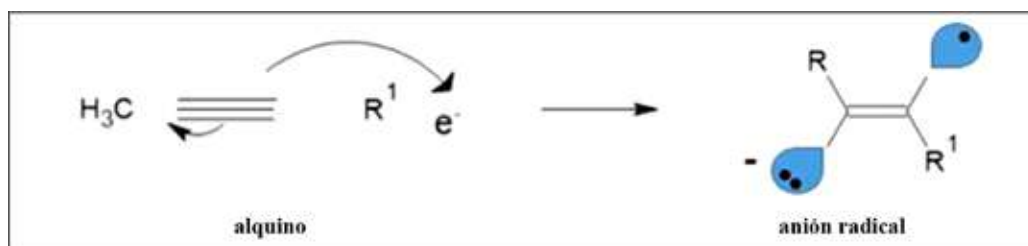
Figura 2.22. Acetileno

2.12. MECANISMO DE REACCIÓN

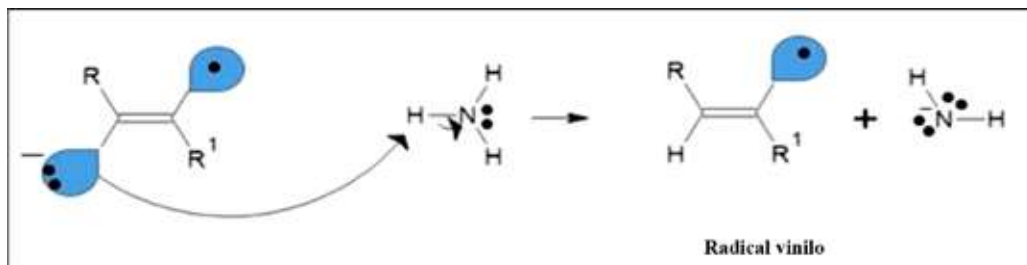
2.12.1. Reducción con metal-amoniaco de un Alquino

Este mecanismo involucra la adición de un electrón, seguido por un protón, luego la adición de un segundo electrón, seguido por un segundo protón.

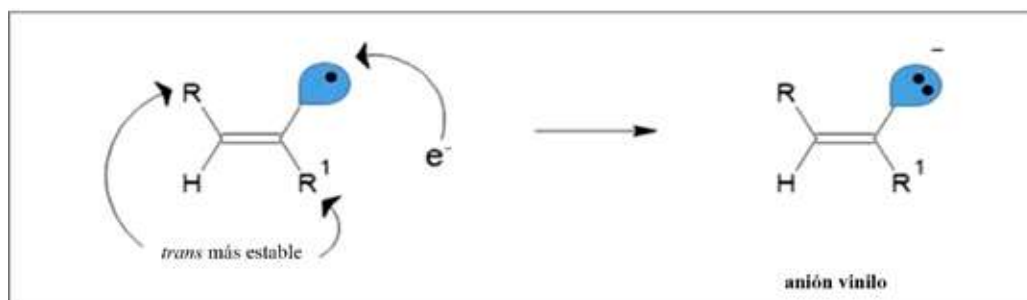
Paso 1: un electrón se adiciona al Alquino, formando un anión radical



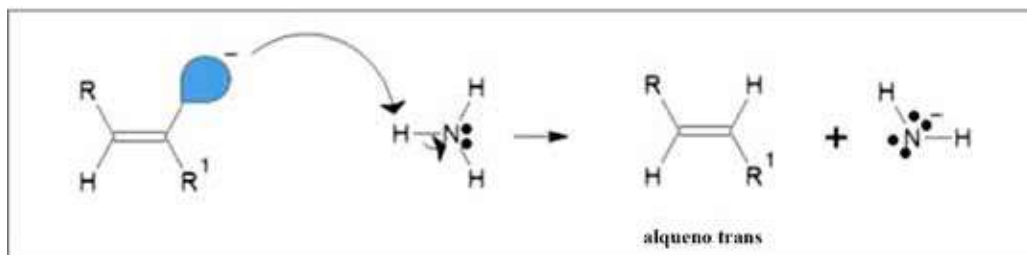
Paso 2: di anión radical es protonado para formar un radical



Paso 3: un electrón se adiciona al radical, formando un anión.



Paso 4: la protonación del anión produce un alqueno.



2.13. ALCOHOLES

Los alcoholes son un tipo de grupo funcional, seguramente los más utilizados como reactivos para la elaboración de compuestos de origen orgánico. La estructura está conformada por carbono, hidrógeno y oxígeno, de los que un grupo OH en sí está anclado a un carbono saturado (sp^3). Muchos compuestos que se encuentran en la naturaleza contienen la función de alcohol. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

El átomo de oxígeno estará anclado a un carbono que esté saturado o a un grupo alquilo común, y este a la vez está anclado a un anillo aromático o bien a un enlace triple o doble. La función química alcohol es considerada como la columna vertebral de la química orgánica.

A continuación, presentamos algunos ejemplos: (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

Tabla 2.3. Ejemplos de alcoholes.

Estructura	Nombre
CH_3-OH	Alcohol metílico (metanol)
CH_3CH_2-OH	Alcohol etílico (etanol)
$CH_3CH_2CH_2-OH$	Alcohol n-propílico (1-propanol)
$CH_2=CH-CH_2OH$	Alcohol alílico (2-propen-1-ol)
 $-CH_2OH$	Alcohol bencílico

2.13.1. Propiedades físicas de los alcoholes

Gran cantidad de los alcoholes simples son fluidos, es decir son líquidos, pero a temperatura ambiente, usualmente estos alcoholes suelen tener cadenas de 11 o hasta 12 átomos de carbono.

El etanol y el metanol son líquidos con característica volátil de fragancia frutal característico y de flujo libre. Los alcoholes que son considerados como alcoholes superiores son los decanoles y butanoles, tienen la característica de tener viscosidad, un número determinado de isómeros ramificados tienden a estar solidificados a una temperatura ambiente. (Wade, 2011)

Tabla 2.4. Propiedades físicas de alcoholes seleccionados

Nombre IUPAC	Nombre común	Fórmula	Pf (°C)	Pe (°C)	Densidad (g/ml)
Metanol	Alcohol metílico	CH ₃ OH	-97	65	0,79
Etanol	Alcohol etílico	CH ₃ CH ₂ OH	-114	78	0,79
Propan-1-ol	Alcohol n-propílico	CH ₃ CH ₂ CH ₂ OH	-126	97	0,80
Propan-2-ol	Alcohol isopropílico	(CH ₃) ₂ CHOH	-89	82	0,79
Butan-1-ol	Alcohol n-butílico	CH ₃ (CH ₂) ₃ OH	-90	118	0,81
Butan-2-ol	Alcohol sec-butílico	CH ₃ CH(OH)CH ₂ CH ₃	-114	100	0,81
2-metilpropan-1-ol	Alcohol isobutílico	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ OH	-108	108	0,80
2-metilpropan-2-ol	Alcohol t-butílico	(CH ₃) ₃ COH	25	83	0,79
Pentan-1-ol	Alcohol n-pentílico	CH ₃ (CH ₂) ₄ OH	-79	138	0,82
3-metilbutan-1-ol	Alcohol isopentílico	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CH ₂ OH	-117	132	0,81
2,2-dimetilpropan-1-ol	Alcohol neopentílico	(CH ₃) ₃ CCH ₂ OH	52	113	0,81
* Observaciones: Pf = Punto de fusión; Pe = Punto de ebullición					

2.13.2. Puntos de ebullición de los alcoholes

Los alcoholes de una masa molecular disminuida son líquidos, por ejemplo, el propano y el alcohol etílico, cuyas masas moleculares son similares. Sin embargo, los puntos de ebullición tienen una diferencia de aproximadamente 120 °C. Mientras que en un punto de ebullición intermedio se encuentra el dimetil éter. (Wade, 2011)

Las moléculas pertenecientes de etanol se aferran entre ellas con demasiada más fuerza que las moléculas de propano; es por ello que se puede explicar por qué hay una gran diferencia en sus puntos de ebullición. Los encargados de esta particularidad son dos relevantes fuerzas intermoleculares: las atracciones dipolo – dipolo y los puentes de hidrógeno Wade (2011)

2.13.3. Propiedades de solubilidad de los alcoholes

Los alcoholes y el agua poseen cualidades similares ya que abarcan grupos hidroxilo que pueden desarrollar acoplamiento por puentes de hidrógeno. Una gran gama de compuestos iónicos, como por ejemplo el cloruro de sodio tiene la capacidad de diluirse en alcoholes que son considerados como inferiores. Aquí hacemos un pequeño paréntesis nombrando que la palabra hidrofílico significa “amigo del agua”; esto pues a que posee una gran afinidad al agua que es una sustancia polar y demás sustancias polares. (Wade, 2011))

2.13.4. Alcoholes comercialmente importantes

2.13.4.1. Metanol

Uno de los disolventes industriales más habituales es el famoso metanol. Es poco tóxico, es económico y tiene la capacidad de disolver una gran gama de sustancias no polares y polares. Es considerada también como la materia prima de disolventes, combustibles, medicinas, compuestos que se aprovechan en plásticos, ésteres metílicos y éteres metílicos. (Wade, 2011)



Figura 2.23. Metanol

2.13.4.2. Etanol

El descubrimiento del etanol data de épocas prehistóricas, ya que se presume que sucedió cuando se ingería fruta ya pasada y como resultado tuvo un efecto intoxicante. Y se sugiere que este descubrimiento dio origen a lo que hoy conocemos como la fermentación de jugos de las frutas. Se presume que el vino antiguo, es decir, el vino primitivo pudo haber sido almacenado sin riesgo alguno de que se descomponga, siendo así también una fuente confiable de agua potable. (Wade, 2011)



Figura 2.24. Etanol

2.13.5. Mecanismo de reacción

2.13.5.1. Mecanismo de la reacción con trihaluros de fósforo

El mecanismo de reacción de trihaluros de fósforo con los alcoholes aclara por qué los haluros de fósforo desempeñan mal con alcoholes terciarios y los reordenamientos no son comunes.

Reacción de alcoholes con PBr₃

Paso 1: el PBr₃ es un electrófilo fuerte. Un alcohol desplaza al ion bromuro del PBr₃ para formar un excelente grupo saliente.



Figura 2.25. Reacción de alcoholes con PBr₃

Paso 2: el bromuro desplaza al grupo saliente para generar el bromuro de alquilo.

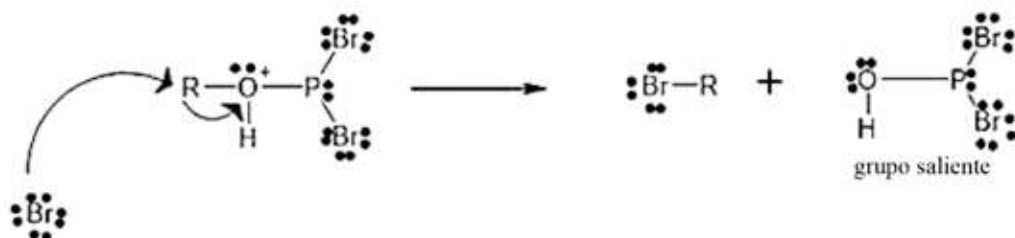


Figura 2.26. Reacción de alcoholes con PBr₃

2.14. CETONAS Y ALDEHÍDOS

Estos componentes químicos son mencionados o son más conocidos como carbonílicos. En su estructura podemos encontrar moléculas de carbono, hidrógeno y oxígeno. Estas moléculas se singularizan por tener en su estructura el famoso grupo carbonillo. El enlace doble es el que se encarga de mantener fusionado tanto el carbono sp² y el átomo de oxígeno. (Autino, Romanelli, y Ruiz, 2013)

2.14.1. Estructura de los compuestos carbonílicos

Estos compuestos carbonílicos tienen su presencia tanto en cetonas y aldehídos, a parte de estos, están presentes en otros grupos funcionales. En el caso de los aldehídos, vemos que tanto uno como dos átomos de hidrógeno se van a encontrar incorporados al carbono con característica carbonílica. Mientras que en las cetonas el átomo de carbono con característica carbonílica se va a encontrar incorporado a dos átomos de carbono. En las siguientes imágenes se puede observar claramente lo dicho. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

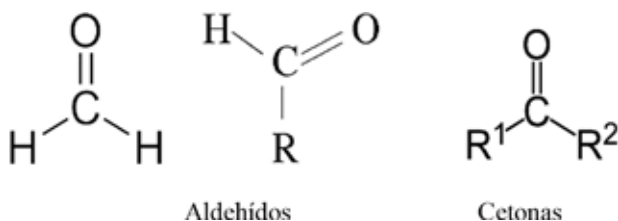


Figura 2.27. Representación de los grupos carbonílicos

2.14.2. Propiedades físicas de las cetonas y aldehídos

Tabla 2.5. Propiedades físicas de las cetonas y aldehídos

Nombre IUPAC	Nombre común	Estructura	Pf (°C)	Pe (°C)	Densidad (g/cm³)	Solubilidad en H ₂ O (%)
Cetonas						
Propan-2-ona	Acetona	CH ₃ COCH ₃	-95	56	0,79	∞
Butan-2-ona	Metiletilcetona	CH ₃ COCH ₂ CH ₃	-86	80	0,81	25,6
Pentan-2-ona	Metil-n-propilcetona	CH ₃ COCH ₂ CH ₂ CH ₃	-78	102	0,81	5,5
Pentan-3-ona	dietilcetona	CH ₃ CH ₂ COCH ₂ CH ₃	-41	101	0,81	4,8
Hexan-2-ona		CH ₃ CO(CH ₂) ₃ CH ₃	-57	127	0,83	1,6
Hexan-3-ona		CH ₃ CH ₂ COCH ₂ CH ₂ CH ₃		124	0,82	
Heptan-2-ona		(CH ₃ CH ₂ CH ₂) ₂ CO	-36	151	0,81	1,5
Heptan-3-ona		(CH ₃) ₂ C=CHCOCH ₃	-39	147	0,82	0,4
Aldehídos						
metanal	formaldehído	HCHO o CH ₂ O	-92	-21	0,82	55
Etanal	Acetaldehído	CH ₃ CHO	-123	21	0,78	∞
Propanal	Propionaldehído	CH ₃ CH ₂ CHO	-81	49	0,81	20
Butanal	n-butiraldehído	CH ₃ (CH ₂) ₂ CHO	-97	75	0,82	7,1
2-metilpropanal	Isobutiraldehído	(CH ₃) ₂ CHCHO	-66	61	0,79	11
Pentanal	n-valeraldehído	CH ₃ (CH ₂) ₃ CHO	-91	103	0,82	
3-metilbutanal	Isovaleraldehído	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CHO	-51	93	0,80	
Hexanal	caproaldehído	CH ₃ (CH ₂) ₄ CHO	-56	129	0,83	0,1
* Observaciones: Pf = Punto de fusión; Pe = Punto de ebullición.						

2.14.3. Punto de fusión

Los puntos de fusión, puntos de ebullición, y solubilidad de ciertos aldehídos y cetonas se encuentran reflejados en la tabla anterior. Aunque los aldehídos y cetonas son puros, es imposible desarrollar uniones por puentes de hidrógeno entre ellos, poseen pares de electrones que no se encuentran enlazados (es decir, que están sin compartir) y tienen la capacidad de ser receptores de uniones de puentes de hidrógenos conjuntamente con otros componentes que poseen enlaces NH u OH. Como, por ejemplo, del OH de la molécula del agua o un alcohol tienen la capacidad de desarrollar un enlace de la molécula de hidrógeno con electrones que no están ligados en un átomo de oxígeno perteneciente del grupo. (Wade, 2011)

2.14.4. Solubilidad

Por el motivo de la creación de las uniones de puente de hidrógeno, tanto los aldehídos como las cetonas son excelentes disolventes para componente o sustancias llamadas hidroxílicas polares, como, por ejemplo, los alcoholes. De igual manera son considerablemente solubles en H₂O. Cabe mencionar que tanto la acetona u el acetaldehído son combinables con el líquido vital, sea cual sea las proporciones. Wade (2011)

El acetaldehído y el formaldehído son considerados como los más comunes de los aldehídos. El formaldehído es considerado como un gas siempre y cuando esté presente a temperatura ambiente, es por ello que con continuidad se acumula y se realiza su uso como una disolución, siendo esta acuosa al 40 % la cual es llamada formalina. Cuando se requiera que el formaldehído esté seco, se puede crear aplicando calor a uno de sus derivados que son sólidos, en general paraformaldehído o trioxano. (Wade, 2011)

2.14.5. Importancia industrial de las cetonas y aldehídos

En la industria química, tanto los aldehídos como las cetonas son utilizados como reactivos, materias primas y disolventes para la producción de una amplia gama de productos. Por ejemplo, el formaldehído es muy conocido con el nombre de formol.



Figura 2.28. Usos de aldehídos y cetonas a nivel industrial

Por otra parte, para la fabricación de fármacos, polímeros y ácido acético se utiliza acetaldehído como materia prima.



Figura 2.29. Uso del acetaldehído como materia prima

Por otro lado, tenemos la cetona, conocida industrialmente como la acetona comercial, se sabe que cada año es usado aproximadamente 3 millones de toneladas de ésta, a nivel mundial.

En la tabla a continuación se puede observar que algunos aldehídos y cetonas comunes suelen presentar sabores y aromas que son ciertamente muy reconocidos. Como, por ejemplo, la piretrina, la cual se la obtiene a partir de flores de la planta pelitre y es aprovechada como un insecticida natural, aunque es bien sabido que su origen no es natural, sea sintética o natural, tiene efectos muy tóxicos cuando entra en contacto con los animales, ya que les provoca vómito, náuseas, alergias severas entre otros efectos nocivos. Wade (2011)

Tabla 2.6. Cetonas y Aldehídos en productos domésticos.

Nombre	Aroma	Usos
Butiraldehído	Mantequilla	Margarina y alimentos
Vainillina	Vainilla	Alimentos y perfumes
Acetofenona	Pistache	Helado
Trans-cinamaldehído	Canela	Dulces, alimentos y fármacos
Alcanfor	“Alcanforado”	Linimentos, inhalantes
Piretrina	Florado	Insecticida de plantas
Carvona	Menta, semilla de comino	Dulce, pasta de dientes, etcétera
Muscona	Aroma almizclado	Perfume

2.15. ÉTERES

2.15.1. Estructura y nomenclatura

Los éteres son componentes cuya fórmula es $R-O-R$, donde las R pueden significar o bien el grupo arilo, o bien el grupo alquilo. La clasificación de los éteres puede ser dos: asimétricos y simétricos. Los asimétricos o también llamados mixtos son aquellos cuando las R son distintas, como ocurre en el metoxietano o como el etil metil éter. Del segundo que hablamos fue de simétrico, donde las R son completamente iguales como ocurre con el dietiléter. Cuando queremos realizar la denominación de estos compuestos nos apoyamos con el sistema IUPAC, el cual se maneja por medio de dos sistemas, es decir, de dos nomenclaturas: la nomenclatura sustitutiva y la nomenclatura radiofuncional. El sistema radiofuncional menciona al radical arílico y al radical alquílico que se juntan con una molécula de oxígeno, finalizando con la palabra éter. En cuanto a la nomenclatura sustitutiva, es aquella nomenclatura que vamos a analizar tomando en cuenta a los éteres como ariloxiderivados o como alcoxi de los hidrocarburos. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

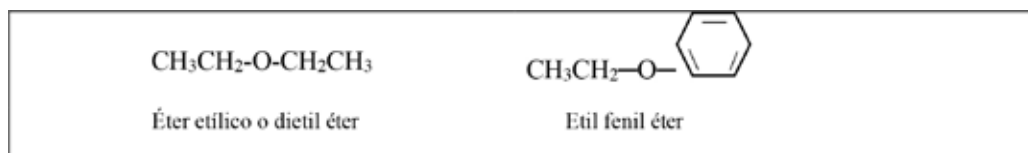


Figura 2.30. Estructuras de éteres

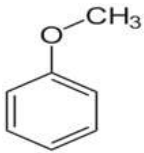
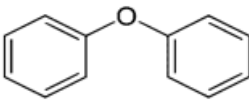
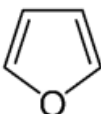
2.15.2. Propiedades físicas de los éteres Polaridad y puntos de ebullición

Ya que se puede observar que el ángulo visto del enlace denominado C-O-C no tiene el valor de 180° , lo que ocurre es que se anulan los momentos o situaciones dipolares de las dos uniones C-O, lo que ocurre es que los éteres van a experimentar una situación dipolar neto. El valor que pertenece al compuesto dietil éter tiene un valor de 1,18 D; esto significa que es un compuesto muy bajo cuando nos referimos a la polaridad. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

A pesar de que los éteres no contengan en su estructura el grupo hidroxilo polar característico de los alcoholes, pues estos éteres siguen siendo compuestos altamente polares. Una suma vectorial de los dos puentes polares C-O significa que el éter está teniendo un momento dipolar, esto acompañado de una suma sustancial de los dos pares de electrones que no se encuentran enlazados. (Wade, 2011)

Tabla 2.7. Propiedades físicas de los éteres

Nombre	Estructura	Pf (°C)	Pe (°C)	Densidad (g/mL)
Éter dimetílico	$\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$	-140	-25	0,66
Éter etil metílico	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{-O-CH}_3$		8	0,72
Éter dietílico	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{-O-CH}_2\text{CH}_3$	-116	35	0,71
Éter di-n-propílico	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{-O-CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	-122	91	0,74
Éter diisopropílico	$(\text{CH}_3)_2\text{CH-O-CH}(\text{CH}_3)_2$	-86	68	0,74
1,2-dimetoxietano	$\text{CH}_3\text{-O-CH}_2\text{CH}_2\text{-O-CH}_3$	-58	83	0,86

Éter metil fenílico		-37	154	0,99
Éter difenílico		27	259	1,07
Furano		-86	32	0,94
Tetrahidrofurano		-108	65	0,89
1,4-dioxano		11	101	1,03
* Observaciones: Pf = Punto de fusión; Pe = Punto de ebullición.				

Ya es bien conocido que los éteres en estado puro no poseen grupos hidroxilo para poder enlazarse por uniones de hidrógeno, entonces lo que pueden hacer es enlazarse con los átomos de hidrógeno de una gama de compuestos que van a poseer estos grupos O-G (grupo hidroxilo) o también N-H. Una unión por puente de hidrógeno solicita un prestador de unión por puente de hidrógeno y un despojador de uniones por puente de hidrógeno. El prestador es la molécula conjuntamente con un grupo N-H u O-H-. El que quita va a ser la molécula donde los pares de electrones no hayan sido enlazados forme, o desarrolle una unión temporal frágil conjuntamente con el átomo de hidrógeno prestado por el que donaba. (Wade, 2011)

2.15.3. Solubilidad de los éteres

Los éteres, al igual que los alcoholes van a presentar una considerable solubilidad en agua; un caso muy claro es la solubilidad que presenta el dietil éter es de 8 g en 100 g del líquido vital; y esta solubilidad es resultado de los puentes de hidró-

geno que puede desarrollar el agua con el éter. Por otro lado, tenemos al n-butano el cual es de 9 gramos en 100 gramos de agua. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013).

Una de las aplicaciones más relevantes de los éteres es su uso como un disolvente en una amplia gama de reacciones de motivo orgánico. Los éteres que son mayormente aprovechados son el tetrahidrofurano y el dietil éter. El tetrahidrofurano se trata de un éter cíclico de un elevado punto de ebullición, es decir un punto de ebullición de 84°C. Hay una amplia gama de éter, como por ejemplo el 1,2- dimetoxietano, este éter no es tan conocido ni aplicado como los anteriormente nombrados, pero también es aprovechado como disolvente en una amplia gama de reacciones orgánica. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

2.16. ÉSTERES

Un éster va a resultar del reemplazamiento de un grupo –OH perteneciente a un ácido carboxílico; va a ser reemplazado por un grupo –OR. El cómo van a ser nombrados los ésteres resulta del cambio de terminación oico del nombre perteneciente al ácido por la terminación oato, prosiguiendo de la palabra <de>, y a continuación el nombre del radical R que se encuentre retenido en el grupo OR. A continuación, se presentan algunos ejemplos. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

Estructura	Nombre
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{H}-\text{C}-\text{O}-\text{CH}_3 \end{array}$	Formiato de metilo o metanoato de metilo
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{CH}_3 \end{array}$	Acetato de metilo o etanoato de metilo
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{OCH}_2\text{CH}_3 \end{array}$	Acetato de etilo o etanoato de etilo

Figura 2.31. Ejemplos de estructuras de ésteres

2.16.1. Propiedades Físicas de los ésteres

2.16.1.1. Polaridad y punto de ebullición

Hay que recalcar que los ésteres son componentes que son polares los cuales con van a formar puentes de H intermolecular. Esto da como resultado el caracterizarse con puntos de ebullición muy bajos a los alcoholes de peso molecular comparable y al de los ácidos carboxílicos. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

2.16.2. Solubilidad

En cuanto a la solubilidad de los ésteres, se puede decir que poseen una solubilidad mucho menor en agua. Muy a diferencia de los ácidos que poseen un peso molecular menor, pero estos últimos poseen la característica de poseer olores muy agradables como olores frutales. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

2.16.3. Los ésteres y sus usos en la industria

Los ésteres se sitúan como los derivados más comunes provenientes de ácidos más simples. Se los encuentran principalmente en los aceites de plantas, estos otorgan el aroma característico a las frutas, es así como se puede saber que dicha fruta está madura o no. Como, por ejemplo, el acetato de isoamilo es el que les otorga el olor característico a los plátanos maduros. Por otra parte, tenemos que el salicilato de metilo es que le otorga el olor característico al aceite de gaulteria, que también es conocido por usarse en medicina. Por otro lado, tenemos a la cumarina, que con pequeñas cantidades es capaz de otorgar longevidad y profundidad a los olores característicos del trébol y del aceite de lavanda. Cuando de un éster ceroso hablamos, nos referimos al esperma de ballena; esto lo usan para controlar cuánto flota en el agua, además de que se piensa también que lo usan como una cámara de resonancia que les permite comunicarse por debajo el agua. (Wade, 2011)

Tabla 2.8. Características relevantes de los ésteres

Nombre del éster	Característica principal
Acetato de Isoamilo	Otorga olor de los plátanos maduros
salicilato de metilo	Otorga olor al aceite de gaulteria
Cumarina	Otorga olor al aceite de lavanda y el trébol
Éster ceroso	Proveniente del esperma de ballena

2.16.4. Reacción de saponificación de ésteres

Como nos hemos percatado, la reacción de esterificación directa de Fisher tiene la cualidad de ser reversible, y por ende, los ésteres tienen la capacidad de hidrolizarse a ácidos carboxílicos y a alcoholes en un ambiente ácido. No obstante, un ambiente básico también es el medio idóneo para que se dé la reacción de los ésteres; pero, cabe recalcar que en esta última situación la reacción no va a ser obligatoriamente una hidrólisis, sino más bien es una saponificación la cual va a ser una reacción irreversible. En este caso lo que ocurre es que el ion hidroxilo va a atacar al carbonilo perteneciente del éster, lo cual deriva en la formación de un intermedio tetraédrico; cuando se origina el grupo catalogado como carbonilo se lleva a cabo la eliminación del ión alcóxido, lo cual va a dar paso a un ácido carboxílico (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013).

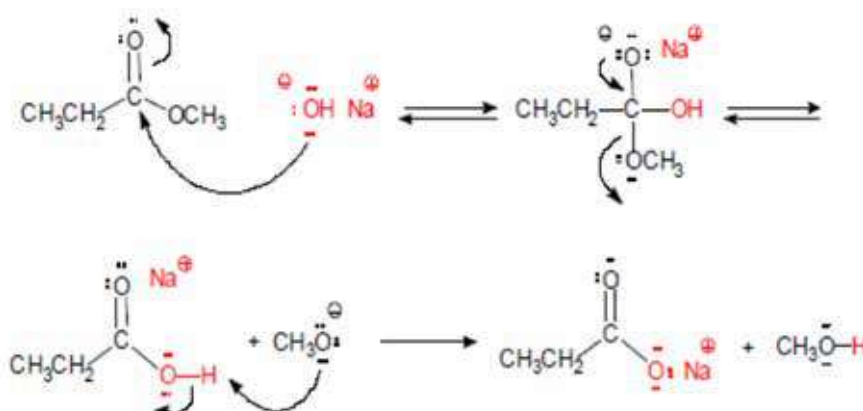


Figura 2.32. Representación de la saponificación de los ésteres

El término conocido como saponificación viene del latín saponis; esto significa jabón. El jabón se lo fabrica por la saponificación que toma lugar en las grasas, lo cual no es más que ésteres de glicerina acompañado de una cadena larga de ácidos grasos o llamados también ácidos carboxílicos. La reacción de saponificación no toma lugar en el H_2O , por lo tanto, se puede decir que no es una hidrólisis. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

2.16.5. Reacción con reactivos de Grignard

Los ésteres van a reaccionar con lo que se conoce como equivalente perteneciente al reactivo de Grignard, lo que va a dar como resultado alcoholes del tipo terciarios. La reacción toma lugar a través de la acción del nucleófilo sobre un grupo carbonílico perteneciente al éster, dando como resultado una cetona, la cual va a reaccionar con otro equivalente para de esta manera dar lugar al alcohol correspondiente. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

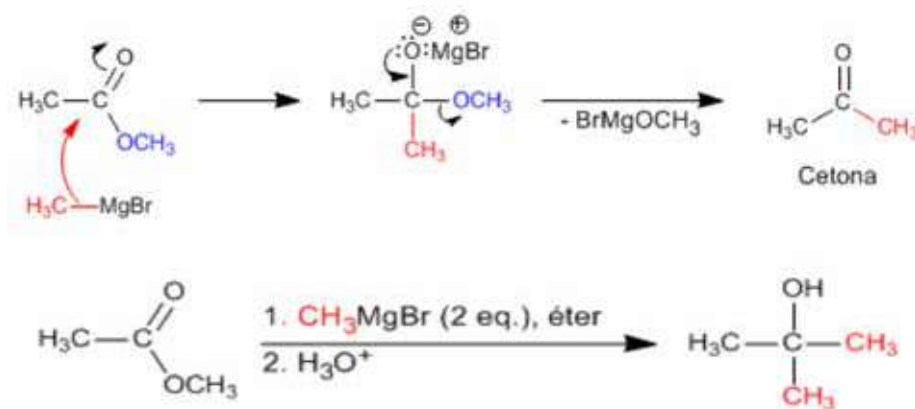


Figura 2.33. Reacción de los ésteres con el Reactivo de Grignard

2.16.6. Reducción de ésteres

Los ésteres se van a reducir a alcoholes haciendo uso de un hidruro de litio y aluminio, que son usados como componentes reductores. Es igual el mecanismo de reacción de ésteres, a que el mecanismo de reducción de cetonas y aldehídos. Ya que no suele obtenerse solamente el aldehído porque la velocidad de reacción es muy alta y solo da como resultado un alcohol. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

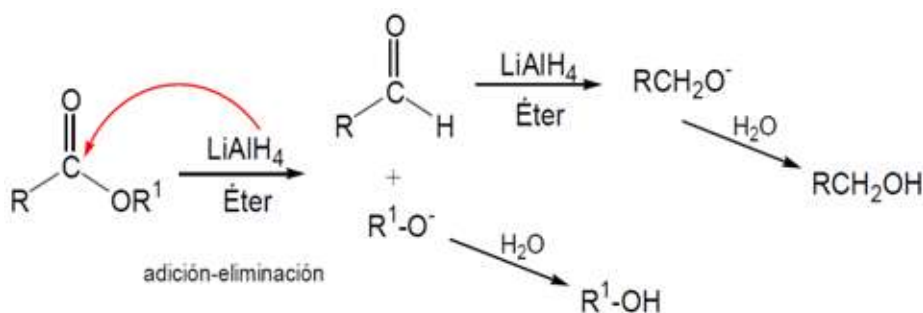


Figura 2.34. Reducción de los ésteres

2.17. AMINAS

Las aminas son aquellos que se derivan de compuestos orgánicos del amonio con más de un grupo arilo o alquilo entrelazados al átomo de nitrógeno. Siendo estas sustancias las aminas que abarcan una gama de compuestos biológicos muy relevantes. Varias son las funciones de las aminas, y cumplen sus funciones sobre organismos vivos. Algunas de estas funciones son la defensa contra depredadores, neurotransmisión y biorregulación. Debido a que el grado de actividad biológica de las amidas es mucho mayor, se las usa como medicinas y fármacos. Los alcaloides son un cúmulo muy primordial de aminas que están activas biológicamente; un gran número de ellas son sintetizadas por plantas para resguardarla de que sean engullidas por una gama de animales e insectos. Es bien sabido que

algunos alcaloides son usados en el área de la salud como medicina, especialmente como analgésicos; pero, cabe recalcar que absolutamente todos son tóxicos, y pueden derivar a la muerte si es consumida en cantidades mayores. Un ejemplo muy particular es que antiguamente los griegos tomaron el alcaloide con el nombre de cicutina o coniina para dar fin a la vida de Sócrates. Aunque pudieron utilizar cocaína, nicotina o morfina que cumplen la misma función que el compuesto en mención. (Wade, 2011)

2.17.1. Nomenclatura de las aminas

La clasificación de las amidas es: primarias, secundarias y terciarias, teniendo como correspondencia a uno, dos o tres cúmulos o grupos arilo entrelazados al nitrógeno. En caso de las aminas heterocíclicas, lo que sucede es que el átomo de nitrógeno forma parte de un anillo aromático o alifático. (Wade, 2011)

Las sales que corresponden al amonio cuaternario poseen cuatro arilos o alquilo que están entrelazados a un átomo de nitrógeno, el mismo que tiene una carga positiva, al igual que las sales de amonio simples, como, por ejemplo, el cloruro de amonio. (Wade, 2011)

2.17.2. Propiedades físicas de las aminas

2.17.2.1. Polaridad de las aminas

Las aminas son muy polares; esto se debe a que el momento dipolar del par que tienen como electrones no unidos se va a sumar a los momentos dipolares de enlaces H_6N y C_6N . En cuanto a las aminas secundarias y primarias poseen enlace $N-H$; esto les permite que se formen uniones por medio de puentes de hidrógeno; en cambio, las aminas terciarias que son puras les es imposible desarrollar uniones por puentes de hidrógeno ya que no poseen uniones $N-H$. Pero pueden desarrollar uniones por puentes de hidrógeno de las moléculas que poseen enlaces $N-H$ o las que poseen $O-H$. (Wade, 2011)

2.17.3. Punto de ebullición de las aminas

Tanto las aminas secundarias como las primarias poseen punto de ebullición menor en comparación a los alcoholes, pero mucho más elevado que los éteres cuya masa molecular es parecida como se aprecia en la tabla 2.9, que muestra la solubilidad, puntos de ebullición y puntos de fusión de algunas aminas simple. (Wade, 2011)

Tabla 2.9. Puntos de fusión, puntos de ebullición y solubilidades en agua de algunas aminas sencillas

Nombre	Estructura	Masa molecular	Pf (°C)	Pe (°C)	Solubilidad en H ₂ O
Aminas primarias					
Metilamina	CH ₃ NH ₂	31	-93	-7	Muy soluble
Etilamina	CH ₃ CH ₂ NH ₂	45	-81	17	∞
n-propilamina	CH ₃ CH ₂ CH ₂ NH ₂	59	-83	48	∞
Isopropilamina	(CH ₃) ₂ CHNH ₂	59	-101	33	∞
n-butilamina	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ NH ₂	73	-50	77	∞
Ciclohexilamina	Cyclo-C ₆ H ₁₁ NH ₂	99	-18	134	Ligeramente soluble
Bencilamina	C ₆ H ₅ CH ₂ NH ₂	107		185	∞
Anilina	C ₆ H ₅ NH ₂	93	-6	184	3,7%
Aminas secundarias					
Dimetilamina	(CH ₃) ₂ NH	45	-96	7	Muy soluble
Dietilamina	(CH ₃ CH ₂) ₂ NH	73	-42	56	Muy soluble
di-n-propilamina	(CH ₃ CH ₂ CH ₂) ₂ NH	101	-40	111	Ligeramente soluble
Diisopropilamina	[(CH ₃) ₂ CH] ₂ NH	101	-61	84	Ligeramente soluble
n-metilnilina	C ₆ H ₅ NHCH ₃	107	-57	196	Ligeramente soluble
difenilamina	(C ₆ H ₅) ₂ NH	169	54	302	Insoluble
Aminas terciarias					
Trimetilamina	(CH ₃) ₃ N	59	-117	3,5	Muy soluble
Trietilamina	(CH ₃ CH ₂) ₃ N	101	-115	90	14%
Tri-n-propilamina	(CH ₃ CH ₂ CH ₂) ₃ N	143	-94	156	Ligeramente soluble
,N-dimetilnilina	C ₆ H ₅ N(CH ₃) ₂	121	2	194	1,4%
trifenilamina	(C ₆ H ₅) ₃ N	251	126	225	Insoluble
* Observaciones: Pf= Punto de fusión; Pe= Punto de ebullición.					

Si no hay la presencia de uniones por puentes de hidrógeno, los puntos de ebullición de las aminas terciarias van a ser muy bajas en comparación con las aminas secundarias y primarias, aún si tienen masas moleculares parecidas. (Wade, 2011)

2.18. AMIDAS

Las amidas tienen su origen del ácido que en su estructura contiene moléculas de carbono, hidrógeno, oxígeno y nitrógeno. La clasificación de las amidas es: amidas N,N-disustituídas, amidas N-sustituídas y amidas no sustituídas. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

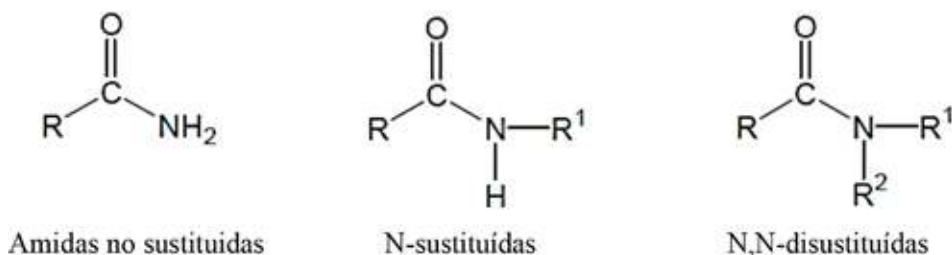


Figura 2.35. Clasificación de las amidas

Estas amidas se encuentran en abundancia en la naturaleza. La nomenclatura de las amidas que no poseen un sustituyente en el átomo de hidrógeno se desarrolla suprimiendo la terminación oico del nombre correspondiente al ácido, y se le aporta la terminación amida. Cuando hay alguno que otro sustituyente en el átomo de nitrógeno que corresponde a la amida, se van a acomodar los nombres correspondientes a los radicales, para ello se le va a agregar la N en mayúscula como lugar de enlace de los que son los sustituyentes. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

2.18.1. Síntesis de amidas

Las amidas son derivados del ácido, cuya capacidad para ser reactivos es muy baja, y pueden formarse a raíz de cualquiera de los demás compuestos. Cuando estamos dentro de un laboratorio, las amidas se llegan a sintetizar a partir de la reacción de un anhídrido o de un cloruro de ácido conjuntamente con una amina. Cuando se habla de síntesis industrial, la que es más común es la de calentar una amina con un ácido a temperaturas muy altas y sin haber oxígeno presente, de esta manera se conserva la condensación. Esta técnica que se ha mencionado es muy sencilla, pero no siempre va a funcionar bien estando en el laboratorio; lo que sí puede ser muy exitosa si se hace uso de un reactivo que se acople. Se puede obtener amidas a partir de la reacción de amoniaco, aminas y éster, también de hidrólisis parcial de los nitrilos. (Wade, 2011)

2.18.2. Propiedades físicas de las amidas

La función amida se representa con una geometría molecular que es plana. Si bien, decimos que vamos a representar el enlace C-N como común, la estructura aporta con una distribución de cargas que es muy relevante que el enlace C-N se comporte como doble. Entonces se puede decir que las amidas son componentes muy polares, más polares que los ácidos carboxílicos, y esto podemos probarlo por la presencia de esta estructura que es de resonancia que va a dar un momento dipolo mayor para estos compuestos. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

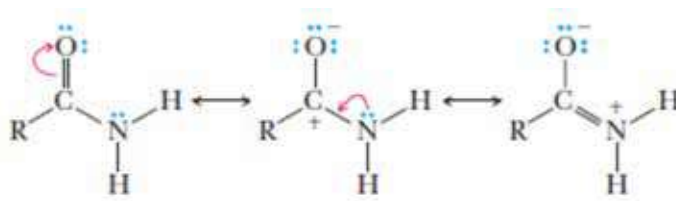


Figura 2.36. Polaridad de las amidas

Las amidas como las N-monosustituídas y las no sustituidas van a caracterizarse por desarrollar enlaces de hidrógeno intermoleculares.

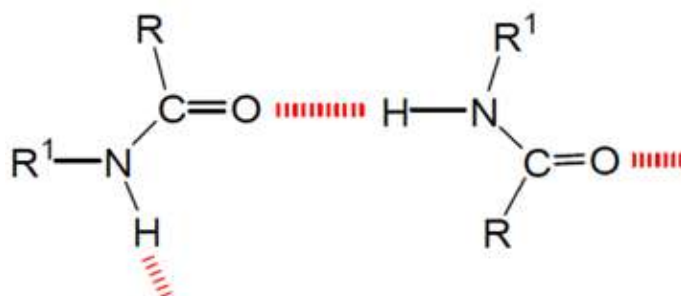


Figura 2.35. Clasificación de las amidas

En cuanto a los puntos de ebullición de las amidas son muy altos en comparación a otras moléculas con iguales pesos moleculares. Pero en relación a su grupo alquilo por efecto del nitrógeno va a disminuir los puntos de ebullición. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

2.18.3. Propiedades químicas

Reducción: las amidas pueden reducirse cuando reaccionan con el litio o con el hidruro de aluminio; de esta manera van a formar aminas. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

Formación de nitrilos: aquí va a entrar un enérgico deshidratante el cual es el pentóxido de fósforo, el cual va a suprimir una molécula de agua de una amida, y de esta forma se obtienen los nitrilos. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

Hidrólisis: la hidrólisis de amidas va a requerir condiciones de reacción más fuertes en ambos procedimientos, a diferencia que la hidrólisis que corresponde a los ésteres, pues de esta última es más rápida. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

2.19. DERIVADOS HALOGENUROS

2.19.1. Estructura y nomenclatura

Se los conoce con el nombre de halogenuros o haluros, y dependiendo del halógeno que presenten en su cadena de carbonos van a ser ioduros, bromuros, cloruros o fluoruros. En su estructura pueden contener uno o más átomos de halógeno que se encuentren enlazados con un carbono. En la siguiente tabla encontramos algunos ejemplos: (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

Tabla 2.10. Ejemplos de haluros de alquilo

Fluoruro de metilo	Dicloruro de metilo	Triioduro de metilo	Tetracloruro de metilo
CH_3F	CH_2Cl_2	CHI_3	CCl_4

2.19.2. Clasificación de los derivados Halogenuros

Se van a clasificar en dos grupos: los haluros de alquilo y los haluros de arilo. En el caso de los haluros de alquilo se da cuando un halógeno está enlazado a un grupo alquilo, mientras que los haluros de arilo se dan cuando el halógeno se sitúa unido a grupos (Autino, Romanelli, y Ruiz, 2013)

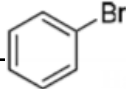
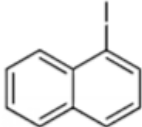
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl}$ $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{F}$	 
Haluros de alquilo	

Figura 2.38. Ejemplos de haluros de alquilo y de arilo

2.20. HALUROS DE ALQUILO

La clasificación de los haluros de alquilo se ven distribuidos en primarios, secundarios o terciarios; esto va a depender si el halógeno en cuestión va a unirse a un carbono ya sea primario, secundario o terciario. Algunos halogenuros especiales que podemos nombrar son los halogenuros de alilo, vinilo y bencilo. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

2.20.1. Propiedades físicas de los haluros de alquilo

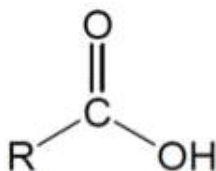
Los haluros de alquilo son moléculas polares. A pesar de que los enlaces C-H pertenecientes de alquilo no son de tipo de polar, se debe tener en cuenta que los halógenos tienden a ser mucho más electronegativos que el carbono, y por ende van a originar un momento dipolar en redirección del halógeno (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

En cuanto a los puntos de ebullición los haluros de alquilo tienen un nivel más alto que los alcanos de peso molecular parecido. La característica es que son insolubles en el líquido vital, son muy solubles en compuestos orgánicos y se disuelven compuestos de manera orgánicos, lo que los hace propicios como solventes de manera industrial. Entre todos ellos se puede destacar al diclorometano, tetracloruro de carbono y cloroformo. La característica principal es que no desarrollan puentes de hidrógeno intermoleculares. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

2.21. ÁCIDOS CARBOXÍLICOS

2.21.1. Estructura y Nomenclatura

Estos compuestos orgánicos llamados ácidos carboxílicos están formados por carbono, hidrógeno y oxígeno, que tiene la particularidad de poseer el grupo carboxilo dentro de su estructura. Este grupo está conformado por un grupo hidroxilo y un grupo carbonilo. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)



Los ácidos carboxílicos se generan de una gama de compuestos orgánicos; entre estos compuestos orgánicos tenemos: ésteres de tiol, amidas, ésteres, anhídridos de ácido y haluros de acilo. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

Tabla 2.11. Ejemplos de ácidos carboxílicos comunes.

Nombre	Estructura
Ácido Carboxílico	RC(O)OH
Haluro de acilo	RC(O)X
Anhídrido	RC(O)OC(O)R^1
Éster	RC(O)OR^1
Amidas	$\text{RC(O)NH}^2\text{RC(O)NHR}^1, \text{RC(O)NR}^1\text{R}^2$
Éster de tiol	RC(O)SR^1

2.21.2. Propiedades físicas de los ácidos carboxílicos

Los ácidos carboxílicos tienen como característica ser sustancias polares, los cuales van a formar puentes de hidrógeno intermoleculares entre ellos mismos y con el líquido vital.

Estos ácidos carboxílicos van a desarrollar dímeros, y estas unidades van a estar enlazadas una con otra mediante el enlace de hidrógeno. Esto demuestra que los ácidos carboxílicos tienen puntos de ebullición demasiado mayores y muy bajo peso molecular, lo que hace que sean solubles en agua sea cual sea la porción.

A medida que la cadena es más extensa la polaridad va a disminuir, y por ende también va a disminuir su solubilidad en el líquido vital. (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

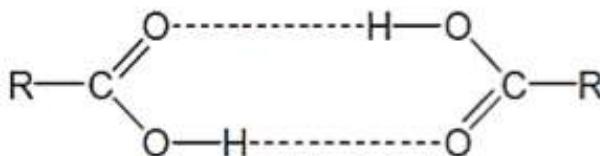


Figura 2.39. Dimerización de un ácido carboxílico

2.21.3. Nomenclatura orgánica

2.21.3.1. Nomenclatura de las funciones químicas orgánicas con sus diferentes grupos funcionales

La nomenclatura hace referencia a la clasificación de los compuestos orgánicos comenzando por los hidrocarburos saturados, hidrocarburos insaturados, compuestos oxigenados y compuestos nitrogenados

Tabla 2.12. Nomenclatura de los diferentes grupos funcionales

Función química orgánica	Grupo Funcional	Fórmula General	Nomenclatura
Alcano	-C-C-	$C_n H_{2n+2}$	sufijo "-ano"
Alqueno	C=C	$C_n H_{2n}$	sufijo "-eno"
Alquino	C≡C	$C_n H_{2n-2}$	sufijo "-ino"
Alcohol	R-OH	$C_n H_{(2n+2)} O$	Prefijo "hidroxi-" + sufijo "-ol"
Aldehído	R-CHO	$C_n H_{2n} O$	Prefijo "formil-" + sufijo "-al"
Cetona	R-CO-R'	$C_n H_{2n} O$	Prefijo "oxo-" + sufijo "-ona"
Ácido carboxílico	R-COOH	$C_n H_{2n} O_2$	Sufijo "-oico"
Éster	R-COO-R'	$C_n H_{2n} O_2$	Prefijo alquilo del R' + sufijo "-ato de" + nombre ácido carboxílico del R
Amida	R-CONH-R'	$C_n H_{(2n+1)} ON$	Prefijo "carbamoil-" + sufijo "-amida"
Amina	R-NH ₂	$C_n H_{(2n+3)} N$	Prefijo alquilo del R + sufijo "-amina"
Nitrilo	R-CN		Prefijo "ciano-" + sufijo "-nitrilo"
Éter	R-O-R'	$C_n H_{(2n+2)} O$	Prefijo alquilo del R' + sufijo "-oxi-" + nombre alquilo del R
Haluro	R-X	$C_n H_{(2n+1)} X$	Prefijo "halo-" + sufijo "-uro"

2.21.4. Nomenclatura de Enantiómeros

Según Arancibia (2013), un carbono asimétrico o quiral es un tipo de carbono de hibridación sp^3 que está enlazado a 4 radicales distintos. Por ende, obligatoriamente no se le considera un carbono asimétrico cuando algunos de los grupos a los que esta enlazado se repite y por ende tampoco habrá en dobles ni en triples enlaces.

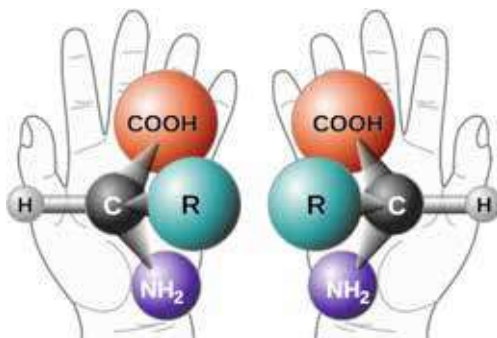


Figura 2.40. Imagen especular de enantiómeros

Fuente: Fernández (2009)

Como vimos a causa de esta propiedad los enantiómeros poseen características ópticas. Si deseamos conocer el número de enantiómeros que presenta una molécula solo se debe aplicar la siguiente fórmula:

$$\text{N}^{\circ} \text{ Enantiómeros} = 2^{\ast C}$$

* **N° Enantiómeros** = Número de enantiómeros

* **C**= Es el número de Carbonos quirales presentes en la molécula Cabildo Miranda (2008)

Como mencionamos, estas moléculas no se superponen, por ende, no son iguales sin embargo si tienen los mismos grupos unidos al carbono asimétrico. Por lo que si las nombramos normalmente tendrían el mismo nombre, por tal motivo necesitamos otra forma de hacerlo, así surge la configuración absoluta o también llamada nomenclatura R, S de enantiómeros.

2.21.5. Configuración Absoluta

Según la Unidad de Informática del Instituto de Química (2016), la configuración absoluta es un descriptor estereoquímico de un centro de quiralidad, nos va a permitir definir inequívocamente la orientación exacta en el espacio que guardan

sus cuatro sustituyentes diferentes. El descriptor es una letra, R o S provenientes del latín rectus, derecho, y sinister, izquierdo, su asignación se hace con base en una serie de reglas que fueron desarrolladas por Cahn, Ingold y Prelog

2.21.6. Nomenclatura R y S

Antes de empezar con la nomenclatura se debe asignar prioridades a los sustituyentes mediante las siguientes reglas:

Regla 1. Hay que tomar en cuenta los átomos que están unidos directamente al estereocentro. Aquel sustituyente con mayor número atómico tiene preferencia sobre los de menor número atómico; el sustituyente con menor prioridad es el hidrógeno y si se trabaja con isótopos prevalece la masa atómica.

Regla 2. Si con la regla 1 no se ha podido decidir la prioridad de cada grupo, se deberá terminar por una comparación similar de los siguientes átomos en cada grupo; esta decisión se toma en el primer punto de diferencia a lo largo de la cadena de dos sustituyentes, una vez determinado eso, lo que constituye el resto de la cadena no se toma en cuenta

Regla 3. Los dobles y triples enlaces se tratan como si fueran sencillos, duplicando o triplicando los átomos de la cadena.

Regla 4. Al tener un centro quiral unido a dos alquenos iguales, el cis tiene preferencia sobre el trans.

Regla 5. Cuando tenemos un carbono asimétrico unido a dos carbonos asimétricos iguales el de la configuración R tiene preferencia sobre la configuración S. Montesdeoca (2018)

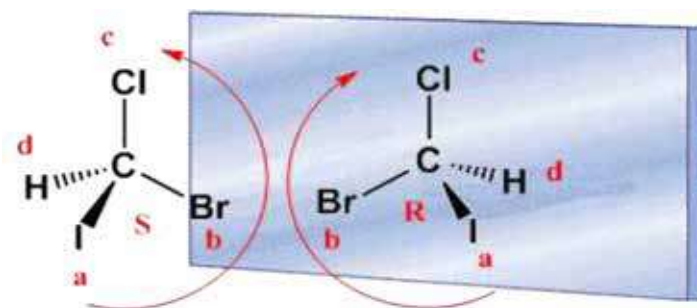


Figura 2.41. Enantiómeros

Fuente: Fernández (2009)

2.21.7. Nomenclatura E y Z

Cuando se encuentran tres o más sustitutos diferentes en un doble enlace de alquenos, el sistema de nomenclatura cis/trans resulta insuficiente. En estos casos se recurre al sistema de nomenclatura Z/E, establecido por la IUPAC, el cual es aplicable a todos los alquenos. La letra Z proviene del término alemán “*zusammen*”, que significa juntos, mientras que la letra E proviene del término alemán que significa opuesto. Estos términos equivalen a lo que representan los términos cis y trans, respectivamente.

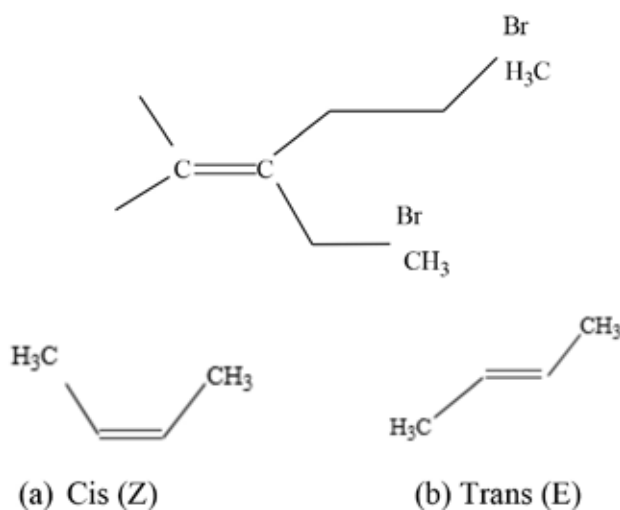


Figura 2.42. Representación de la nomenclatura geométrica (a) Cis y (b) Trans

La rigidez y falta de rotación de los enlaces dobles carbono - carbono originan la isomería cis-trans, también conocida como isomería geométrica. Si dos grupos similares, enlazados a los carbonos del enlace doble se encuentran del mismo lado del enlace, el alqueno es el isómero cis. Si los grupos similares se encuentran en lados opuestos del enlace, el alqueno es el isómero trans. No todos los alquenos pueden presentar isomería cis-trans. Si cualquiera de los carbonos del enlace doble tiene dos grupos idénticos, la molécula no puede tener formas cis y trans. A continuación, aparecen algunos alquenos cis y trans, y algunos alquenos que no pueden presentar este tipo de isomería

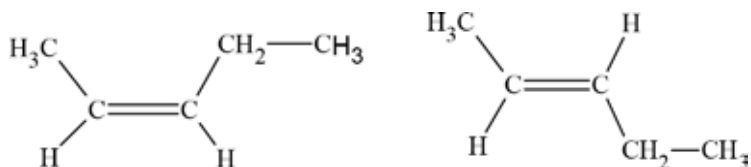


Figura 2.43. Nomenclatura Cis y Trans

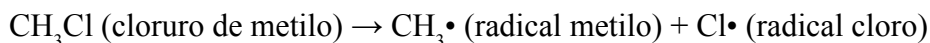
2.21.8. Rupturas homolíticas y heterolíticas

2.21.8.1. Ruptura homolitica

La ruptura homolítica es un proceso en el cual un enlace químico se divide de manera equitativa, donde cada átomo involucrado en el enlace recibe uno de los electrones compartidos. Este tipo de ruptura da lugar a la formación de radicales libres, que son especies químicas con un electrón no apareado. Durante la ruptura homolítica de un enlace, los dos electrones asociados se separan, dejando a cada átomo con un electrón individual, lo que da lugar a la formación de dos fragmentos con un electrón sin pareja. Estos fragmentos son conocidos como radicales libres y exhiben una alta reactividad debido a la presencia del electrón sin emparejar.

La ruptura homolítica es un fenómeno común en las reacciones que involucran radicales libres, ya que estos radicales pueden participar en una variedad de transformaciones químicas, incluyendo reacciones de adición, sustitución y eliminación.

Un ejemplo de ruptura homolítica es la reacción de cloruro de metilo (CH_3Cl) con luz o calor, que produce dos radicales libres: un radical metilo ($\text{CH}_3\cdot$) y un radical cloro ($\text{Cl}\cdot$).



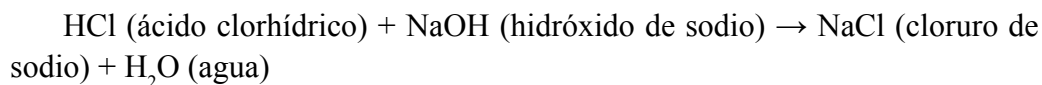
En esta reacción, el enlace entre el carbono (C) y el cloro (Cl) se rompe de manera homolítica, y cada átomo recibe uno de los electrones compartidos del enlace. Esto da lugar a la formación de dos radicales libres: el radical metilo con un electrón no apareado en el carbono ($\text{CH}_3\cdot$) y el radical cloro con un electrón no apareado en el cloro ($\text{Cl}\cdot$).

Estos radicales libres pueden participar en diversas reacciones, como reacciones de adición a dobles enlaces, reacciones de sustitución en otros compuestos orgánicos, o incluso iniciar reacciones en cadena de radicales libres.

2.21.8.2. Ruptura heterolítica

La ruptura heterolítica es un proceso en el cual un enlace químico se divide de manera desigual, donde los electrones compartidos del enlace se desplazan hacia uno de los átomos involucrados en el enlace. Como resultado, se forman iones cargados: uno con carga positiva (catión) y otro con carga negativa (anión).

Un ejemplo común de ruptura heterolítica es la reacción de un ácido con una base para formar una sal. Por ejemplo, la reacción entre el ácido clorhídrico (HCl) y el hidróxido de sodio (NaOH) produce cloruro de sodio (NaCl) y agua (H_2O):



En esta reacción, el enlace entre el hidrógeno (H) y el cloro (Cl) en el ácido clorhídrico se rompe de manera heterolítica. Los electrones del enlace se despla-

zan hacia el átomo de cloro, lo que resulta en la formación de un catión H^+ y un anión Cl^- . Al mismo tiempo, el hidróxido de sodio se disocia en un catión Na^+ y un anión OH^- .

La combinación de los iones H^+ y OH^- da lugar a la formación de agua (H_2O), mientras que los iones Na^+ y Cl^- se combinan para formar cloruro de sodio (NaCl).

En la representación de una ruptura heterolítica, se utiliza una flecha curvada hacia la dirección del electrón desplazado (+) para indicar la formación de los iones cargados.

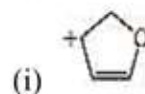
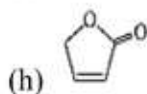
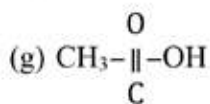
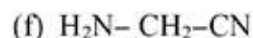
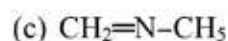
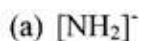
2.22. EJERCICIOS PROPUESTOS

1. Para cada uno de los siguientes compuestos e iones:

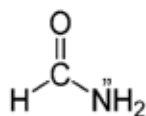
Dibuje una estructura de Lewis.

Muestre los tipos de orbitales que se traslapan para formar cada enlace

De los ángulos aproximados de enlace alrededor de cada átomo, con excepción del hidrógeno.

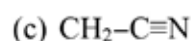
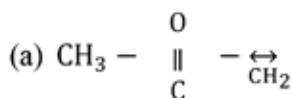


2. En la mayoría de las aminas, el átomo de nitrógeno tiene una hibridación sp^3 , estructura piramidal y ángulos de enlace cercanos a los 109° . En el caso de la formamida, se ha encontrado que el átomo de nitrógeno es plano, con ángulos de enlace cercanos a los 120° . Explique este hallazgo sorprendente. (Pista considere las formas de resonancia y el traslape necesario en ellas).

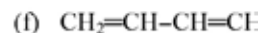
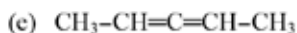
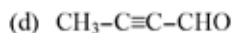


formamida

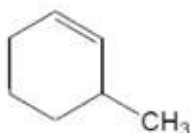
3. Prediga la hibridación y geometría de los átomos de carbono y nitrógeno de los siguientes iones, (Pista: resonancia).



4. Dibuje los orbitales de los enlaces pi en los siguientes compuestos



5. Dibuje la estructura del *cis*- $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{CH}_3$, y muestre el enlace pi con su geometría adecuada. Encierre en un círculo los seis átomos coplares de este compuesto, dibuje el isómero *trans*. ¿Aún son seis?



6. El ciclopropano (C_3H_6 , un anillo de tres miembros) es más reactivo que la mayoría de los demás cicloalcanos.
- a) Dibuje una estructura de Lewis para el ciclopropano.
 - b) Compare los ángulos de enlace de los átomos de carbono en el ciclopropano con los de un alcano acíclico (no cíclico).
 - c) Explique por qué el ciclopropano es tan reactivo.

CAPÍTULO III. ALCANOS O PARAFINAS

3.1. INTRODUCCIÓN

Los alcanos son una clase de hidrocarburos, compuestos exclusivamente por átomos de carbono e hidrógeno, caracterizados por presentar enlaces simples entre los átomos de carbono. También son conocidos como hidrocarburos saturados, ya que todos los enlaces carbono-carbono están saturados con hidrógeno, lo que implica la ausencia de enlaces dobles o triples.

Estos compuestos químicos juegan un papel crucial en la industria y en nuestra vida cotidiana, ya que constituyen la base de muchos combustibles fósiles, como el petróleo y el gas natural. Además, los alcanos forman parte de la estructura molecular de muchas sustancias presentes en productos como plásticos, ceras y lubricantes.

La nomenclatura de los alcanos se basa en la cantidad de átomos de carbono que conforma la cadena principal de la molécula. Algunos ejemplos comunes incluyen el metano (CH_4), el etano (C_2H_6), el propano (C_3H_8) y el butano (C_4H_{10}). A medida que el número de átomos de carbono en la cadena aumenta, se utilizan prefijos numéricos griegos para nombrarlos, como pentano (C_5H_{12}), hexano (C_6H_{14}), y así sucesivamente.

Los alcanos son compuestos no polares y presentan puntos de ebullición y fusión relativamente bajos, lo que les otorga una naturaleza volátil y una gran capacidad para ser utilizados como combustibles. Además, son pocos reactivos y generalmente participan en reacciones de combustión, donde se combinan con oxígeno para liberar energía.

En resumen, los alcanos son hidrocarburos saturados, compuestos por átomos de carbono e hidrógeno unidos por enlaces simples. Son importantes en la industria y en nuestra vida cotidiana, siendo la base de muchos combustibles y sustancias químicas.

3.2. ESTRUCTURA, NOMENCLATURA Y PROPIEDADES FÍSICAS

3.2.1. Estructura

Los alcanos presentan hibridación sp^3 que disponen sus cuatro sustituyentes hacia los vértices de un tetraedro

El primer miembro de la familia de los alcanos es el metano el cual presenta estructura tetraédrica, su fórmula es CH_4 presenta hibridación sp^3 igual que todos los alcanos y contiene enlace sigma entre el carbono y el hidrógeno, su ángulo de enlace es de $109,5^\circ$. Las distancias entre los enlaces de carbono y el hidrógeno son de $1,10 \text{ \AA}$. (Gómez Sierra, 2009)

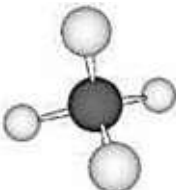
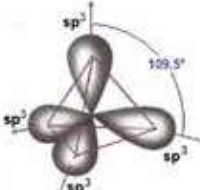
Estructura condensada	Estructura desarrollada	Estructura de Lewis	Estructura de bolas y barras	Orbitales de metano
CH_4	$ \begin{array}{c} H \\ \\ H - C - H \\ \\ H \end{array} $	$ \begin{array}{c} H \\ \\ H : \overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{C}} : H \\ \\ H \end{array} $		

Figura 3.1. Representación de la hibridación sp^3

3.2.2. Nomenclatura

El sistema de nomenclatura fue creado por la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC: International Union of Pure and Applied Chemistry). En el sistema IUPAC un nombre químico tiene por lo regular cuatro partes: prefijo, localizador, cadena principal y sufijo.

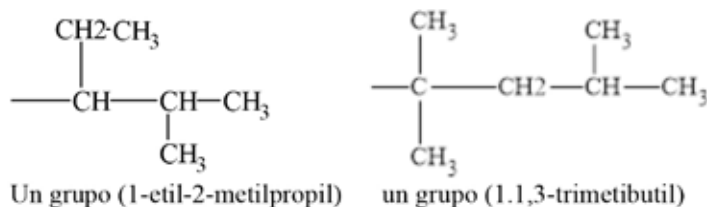
El prefijo específico la localización y la identificación de varios grupos sustituyentes en la molécula, el localizador indica la ubicación del grupo funcional primario, la cadena principal selecciona una parte principal de la molécula e indica cuántos átomos de carbono están en esta parte y el sufijo identifica al grupo funcional primario. McMurry (2012)

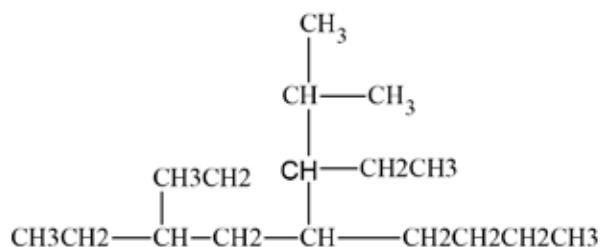


Figura 3.2. Uso de prefijo

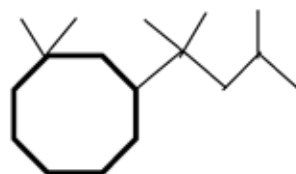
Se darán las reglas aplicables de la IUPAC a medida que incluyamos nuevos grupos funcionales. Todos los alcanos de cadena ramificada, exceptuando los más complejos, pueden nombrarse siguiendo cuatro pasos y se necesita un quinto paso para muy pocos compuestos McMurry (2012)

Se utiliza la terminación -ano para todos los alcanos y cicloalcanos Holum (1999).





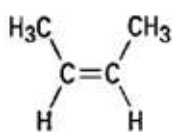
3-etil-5-(1-etil-2-metilpropil) nonano



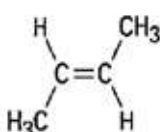
1,1-dimetil-3-(1,1,3-trimetilbutil) ciclooctano

3.3. LA TERMINACIÓN -ANO PARA TODOS LOS ALCANOS Y CICLOALCANOS

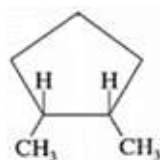
3.2.3. Nomenclatura Cis y Trans



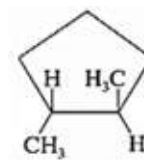
Cis-2-buteno



Tran-2-buteno



Cis-1,2,dimetilciclopentano



Trans-1,2,dimetilciclopentano

3.2.4. Propiedades físicas

- Los primeros cuatro compuestos (metano hasta n-butano) son gases.
- Del n-pentano hasta los hexadecanos son líquidos
- A partir de compuestos posteriores a los 16 carbonos son sólidos.
- Interacción por las 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.

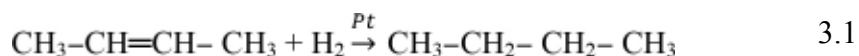
- Los puntos de ebullición también aumentan con el peso molecular, cuanto más pesada es una molécula más energía requiere para pasar del estado líquido al gaseoso.
- Los alcanos ramificados poseen superficies más pequeñas que sus isómeros lineales, por lo que las fuerzas atractivas son menores, dando lugar a puntos de fusión y ebullición más bajos.
- 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.

3.2.5. Métodos de preparación

Hay varios métodos de preparación de alcanos, y la elección del método depende de los compuestos y condiciones disponibles. A continuación, se indican algunos de los métodos más comunes para la preparación de alcanos:

3.2.6. Hidrogenación de alquenos:

Los alquenos son hidrocarburos que tienen un doble enlace carbono-carbono. La reacción de hidrogenación catalítica permite convertir un alqueno en alcano. Esta reacción sucede en presencia de un catalizador, como paladio (Pd), platino (Pt) o níquel (Ni), y bajo condiciones de alta presión de hidrógeno.



3.2.5.2. Deshidrohalogenación de haluros de alquilo

Los haluros de alquilo, son compuestos orgánicos que tienen un halógeno unido a un carbono y pueden generar una reacción de deshidrohalogenación con la presencia de una base fuerte, como el hidróxido de sodio (NaOH), para dar

lugar a la formación de alcanos. En esta reacción, el haluro de alquilo pierde un átomo de halógeno y se forma un enlace carbono-carbono.

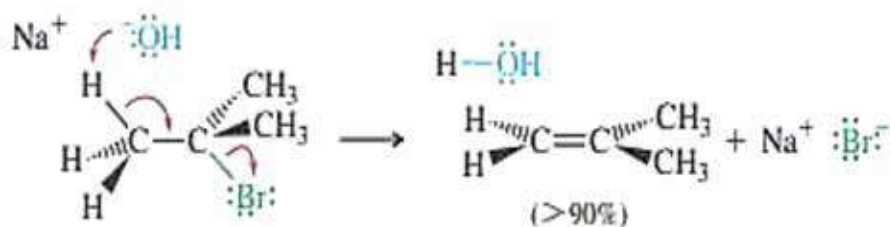
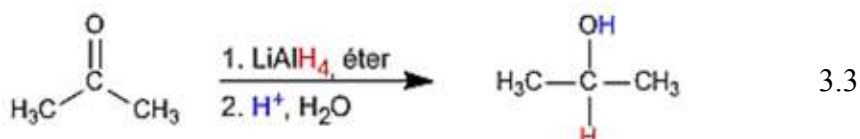
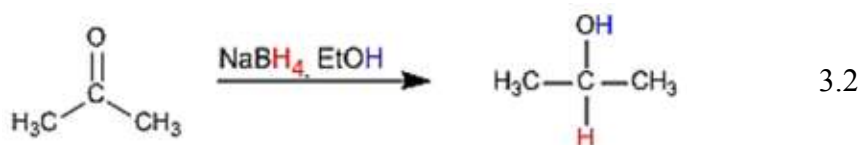


Figura 3.5. Los haluros del alquilo

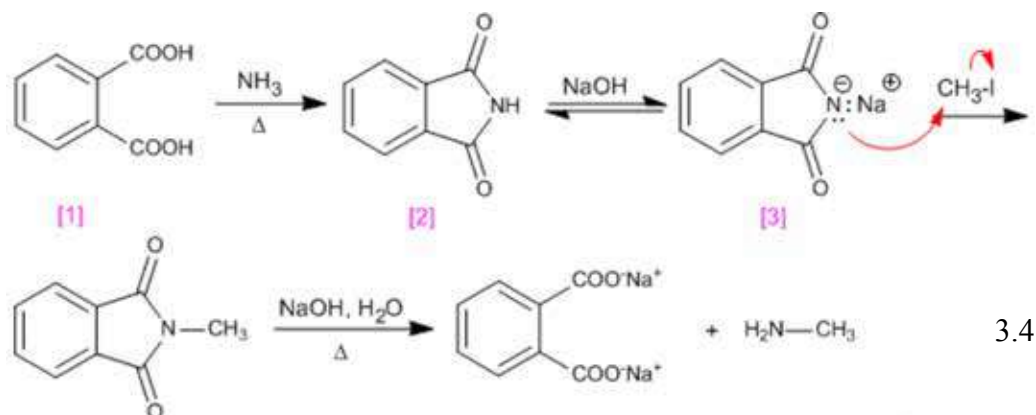
3.2.5.3. Reducción de aldehídos y cetonas:

Los aldehídos y cetonas se reducen a alcanos utilizando agentes reductores. El hidruro de litio y aluminio (LiAlH_4) o el hidruro de sodio y borohidruro de sodio (NaH/NBH_4), son buenos agentes reductores. Estos agentes donan hidrógenos al carbono carbonílico, convirtiendo el grupo funcional en un grupo metileno ($-\text{CH}_2-$), lo que resulta en la formación de un alcano.



3.2.6. Hidrólisis de haloalcanos:

Los haloalcanos son compuestos orgánicos que contienen un halógeno unido a un carbono, y pueden ser sometidos a una reacción de hidrólisis con agua en presencia de una base fuerte (NaOH). Estas reacciones permiten formar alcoholes y luego pueden ser deshidratados para obtener alcanos.



3.2.7. Reacciones de sustitución radicalaria

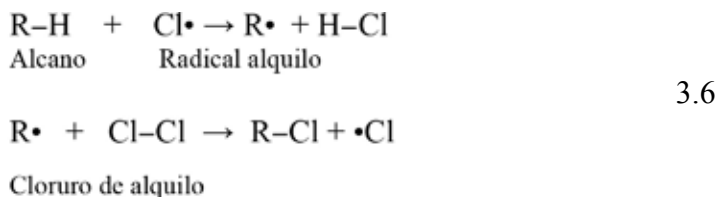
Las reacciones de sustitución radicalaria son reacciones químicas en las que un radical (un átomo o grupo de átomos con un electrón desapareado) reemplaza a otro átomo. Estas reacciones suelen involucrar la sustitución de un hidrógeno en la cadena de carbono por un radical.

Las reacciones de sustitución radicalaria de alcanos son típicamente iniciadas por radicales libres generados a partir de fuentes de energía, como la luz ultravioleta o el calor. A continuación, se muestra el mecanismo de reacción, dado en tres etapas:

Iniciación: se genera un radical libre a partir de una molécula estable mediante la absorción de energía. Por ejemplo, la luz ultravioleta puede romper una molécula de halógeno (como Cl_2 o Br_2) para generar dos radicales libres de halógeno.



Propagación: el radical libre generado en la etapa de iniciación reacciona con el alcano, arrancando un hidrógeno y formando un nuevo radical. Este radical puede reaccionar con otra molécula de halógeno, generando un nuevo radical de halógeno y continuando así la cadena de reacciones.



Terminación: los radicales libres presentes en el sistema pueden combinarse entre sí para formar productos no deseados. Estos productos pueden incluir alcanos ramificados, alquenos y compuestos aromáticos, entre otros.

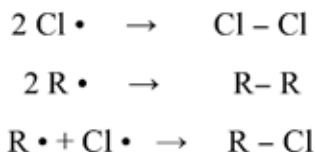


Figura 3.6. Mecanismos de reacción

3.2.7.1. Hidrolisis de reactivos de Grignard

Los reactivos de Grignard son ciertos compuestos organometálicos en las cuales se presentan en su molécula un enlace carbono unido a un metal el cual es muy reactivos los cuales pueden ser caracterizan por la unión de carbono a un metal: litio, potasio, sodio, zinc, mercurio, plomo, talio. (Cabildo Miranda, 2008)

Este tipo de mecanismo se forman por reacciones de derivados halogenados o también como son conocidos como halogenuros de alquilo, derivados de hidrocarburos en los que uno o más hidrógenos están sustituidos por un halógeno, entre ellos se encuentra como el magnesio en la que se también se utiliza un éter etílico como disolvente para poder realizar el mecanismo.

En el reactivo de Grignard tiene la formula general de R-Mg-X con el nombre general de halogenuro de alquilmagnesio. Por lo tanto, enlace carbono-magnesio es covalente pero muy polar, pero por otro lado el enlace magnesio halógeno es esencialmente iónico. (Gómez Sierra, 2009)

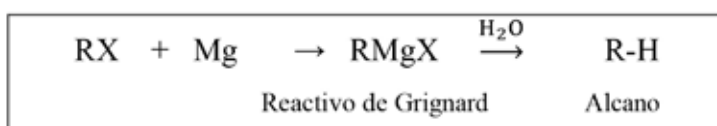


Figura 3.7. Reacción de Grignard

El reactivo de Grignard se combina con muchas sustancias inorgánicas, como agua, dióxido de carbono y oxígeno, así como con la mayoría de los compuestos orgánicos, por lo que, en muchos casos esta reacción es la mejor manera de obtener un tipo de materia orgánica que se necesite. Esta reacción con el agua (H₂O) para formar alcanos es una típica reacción ácido-base ya que como se comporta reactivo de Grignard se consideraría como una base y el del agua como un ácido ya que el mismo es considerado como ácido y base. (Gómez Sierra, 2009)

3.2.8. Reacción de Wurtz

En nombre de su creador, Charles Adolf Wurtz, es aquella reducción biomolecular de halogenuros de alquilo en presencia del compuesto de sodio metálico el cual da como producto un alcano el cual va a dar una formación de un nuevo enlace entre carbono y carbono. (Brito Arias, 2008)

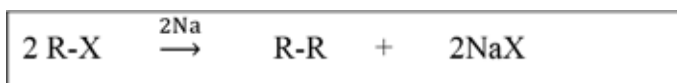


Figura 3.8. Reacción de Wurtz

En este mecanismo la letra R es un radical libre y X el halógeno. Este procedimiento se usa mejor para obtener alcanos con una estructura de cadena simétrica y de un par de átomos de carbono, porque si se obtiene un alcano asimétrico o con número impar de átomos de carbono, ya que ello implicaría emplear halogenuros diferentes obteniéndose una mezcla de tres alcanos diferentes en los productos. El procedimiento se basa en la reacción de varias moléculas del derivado mono halógeno con sodio metálico, resultando directamente en el correspondiente alcano más sal. El sodio reacciona con el bromuro o el yoduro de alquilo, pero es muy difícil que reacciona con el cloruro. Vidaurri (2009)

3.2.9. Síntesis de Kolbe

Fue diseñado por el alemán Herman Kolbe. Se forma por la descomposición electrolítica del éster de sodio en una solución acuosa. Bajo la acción de una corriente eléctrica se produce un alcano más dióxido de carbono en el ánodo, el cual es el electrodo donde se lleva a cabo la oxidación e hidrógeno más hidróxido de sodio en el cátodo donde es el electrodo donde se lleva a cabo la reducción. (De Paz 2011)

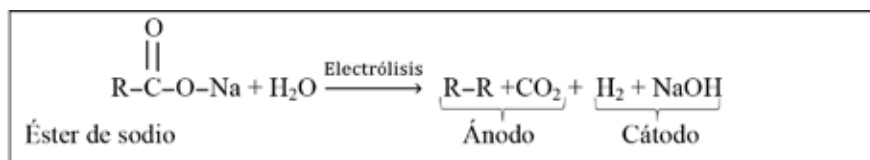


Figura 3.9. Síntesis de Kolbe

En este proceso se obtienen los alcanos por electrolisis de sales de sodio, potasio o incluso del calcio. (Paredes, Yates, y Zuluaga, 2011)

3.2.10. SÍNTESIS DE COREY-HOUSE

Consiste en grupos de derivados halogenados con dialquilocuprados de litio el cual reacciona con un haluro de alquilo los cuales se trata de compuestos organometálicos inestables que se preparan in situ, es decir, que se analizan precisamente en el lugar y condiciones en que se desarrollan mediante la interacción de compuestos organolépticos con sales el de monoyoduro de cobre Cu (I), formando un nuevo alcano o un Halo alcano. (Cabildo y Pilar, 2008), como sigue a continuación:

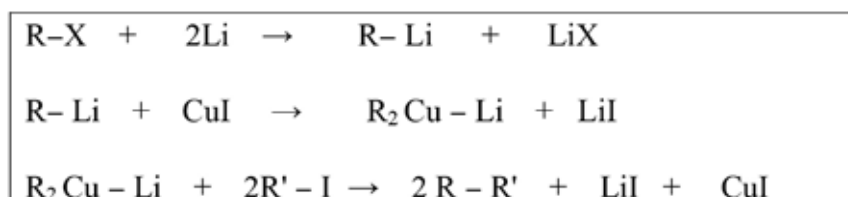


Figura 3.10. Síntesis de Corey-House

Después de todos estos mecanismos cabe señalar que los alcanos reaccionan con los halógenos para producir halogenuros de alquilo de acuerdo con el mecanismo de radicales, que incluye procesos como la iniciación, difusión y terminación; donde, el paso de iniciación determina la velocidad del proceso y el orden creciente de la reacción aumenta con el bromo al flúor, pero con yodo no se produce la reacción. (Cabildo y Pilar, 2008)

3.2.11. Aplicaciones

Los alcanos tienen una amplia gama de aplicaciones en diversas áreas. Algunas de las principales aplicaciones de los alcanos incluyen:

Combustibles: los alcanos son la base de muchos combustibles utilizados en la industria y el transporte. El petróleo crudo, una mezcla de alcanos, se utiliza como fuente de combustible para automóviles, aviones, barcos y generación de energía.

Productos químicos y materiales: los alcanos son utilizados en la producción de una amplia variedad de productos químicos y materiales. Por ejemplo, se utilizan como materia prima en la fabricación de plásticos, como el polietileno. Otra aplicación es en la producción de productos químicos orgánicos, como disolventes, lubricantes, detergentes y productos farmacéuticos.

Industria del cuidado personal: los alcanos se utilizan en la fabricación de productos para el cuidado personal, como cosméticos, cremas, lociones y productos para el cuidado del cabello. Estos compuestos ayudan a proporcionar textura, suavidad y emoliencia a los productos.

Refrigerantes: algunos alcanos halogenados, como los clorofluorocarbonos (CFC) y los hidroclorofluorocarbonos (HCFC), se han utilizado históricamente como refrigerantes en sistemas de refrigeración y aire acondicionado. Sin embargo, debido a su impacto negativo en la capa de ozono, su uso se ha restringido promoviendo la adopción de refrigerantes más amigables con el medio ambiente.

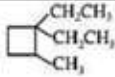
Las anteriores solo algunas de las muchas aplicaciones de los alcanos en diversos sectores industriales y de consumo. Su versatilidad y disponibilidad hacen que sean compuestos químicos esenciales en nuestra vida cotidiana

3.3. EJERCICIOS PROPUESTOS:

1. Dibuje la estructura que corresponda a cada nombre.
 - (a) 3-etiloctano
 - (b) 2,3-dimetil-4-propilnonano
 - (c) cis-1-etil-4-metilciclohexano
 - (d) isopropildecano
 - (e) 2,2,4,4-tetrametilhexano
 - (f) isobutilciclopentano
 - (g) sec-butilcicloheptano
 - (h) trans-1,3-dietilciclopentano
 - (i) ter-butilciclohexano
 - (j) pentilciclohexano
 - (k) ciclobutilciclohexano
 - (l) cis-1-bromo-3-clorociclohexano

2. Cada una de las siguientes descripciones aplica a más de un alcano. En cada caso dibuje y nombre dos estructuras que coincidan con la descripción.
 - (a) un dietildecano
 - (b) un cis-dietilciclohexano
 - (c) un isopropilheptano
 - (d) un trans-dihalociclopentano
 - (e) un (2,3-dimetilpentil cicloalcano
 - (f) un biciclononano

3. Escriba estructuras de una serie homologa de alcoholes (R-OH) que tenga de uno a seis átomos de carbono. Dé el nombre IUPAC de los siguientes alcanos.

(a) $\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	(b) $\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}_3 \\ \qquad \qquad \\ \text{CH}_3\text{CHCH}_3 \quad \text{CH}_3\text{CHCH}_3 \end{array}$
(c) 	(d)  (e) 

4. Dibuje y nombre ocho isómeros con la fórmula molecular C_8H_{18} .
5. Los siguientes nombres son incorrectos o están incompletos, pero representan estructuras reales. Dibuje cada estructura y nómbrela correctamente.
- (a) 2-etilpentano
 - (b) 3-isopropilhexano
 - (c) 5-cloro-4- metilhexano
 - (d) 2-dimetilbutano
 - (e) 2-ciclohexilbutano
 - (f) 2,3-dietilciclopentano
6. Utilice una proyección de Newman, alrededor del carbono indicado, para representar al confórmero más estable de cada compuesto.
- (a) 3-metilpentano alrededor del enlace C2-C3
 - (b) 3,3-dimetilhexano alrededor del enlace C3-C4
7. Dibuje proyecciones de Newman a lo largo del enlace C3-C4 para mostrar las conformaciones más y menos estables del 3-etil-2,4, 4-trimetilheptano.

CAPÍTULO IV. ALQUENOS U OLEFINAS

4.1. INTRODUCCIÓN

Los alquenos son hidrocarburos insaturados pertenecientes a la familia de los compuestos orgánicos. Se caracterizan por tener al menos un enlace doble carbono-carbono (-C=C-) en su estructura molecular. Esta doble ligadura confiere a los alquenos propiedades químicas y físicas distintivas.

Los alquenos se pueden encontrar tanto en la naturaleza como en productos derivados del petróleo. Su estructura lineal o ramificada permite una amplia variedad de isómeros, lo que significa que pueden existir múltiples compuestos con la misma fórmula molecular, pero con diferentes configuraciones espaciales.

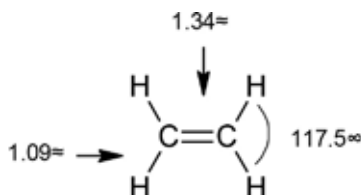
En resumen, los alquenos son compuestos orgánicos insaturados con al menos un enlace doble carbono- carbono. Su estructura y reactividad les confieren propiedades únicas y tienen diversas aplicaciones en la industria química y en la naturaleza.

4.2. ESTRUCTURA, NOMENCLATURA Y PROPIEDADES FÍSICAS

4.2.1. Estructura

Los alquenos como mencionamos anteriormente son hidrocarburos, los cuales poseen uno o más dobles enlaces; para conocer más de su estructura haremos mención al eteno o etileno, ya que es un compuesto de dos carbonos unidos por un doble enlace; podemos decir que es una molécula plana que posee ciertos ángulos y longitudes en los enlaces que forman este compuesto; con respecto a las longitudes es dado señalar que la longitud del enlace C-H en el eteno es de

1,08 Å, y la longitud de enlace del C=C es de 1,33 Å, mientras que el ángulo que se forma en el enlace de C-C-H es de 121,7° y en el enlace que se forma entre el H-C-H es de 116,6° (Paredes, Yates y Zuluaga, 2011)



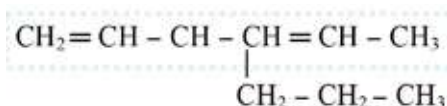
4.1

4.2.2. Nomenclatura

Para nombrar a los alquenos, Martínez Márquez (2012), considera que su nomenclatura es igual al de los alcanos, con la única diferencia de que su terminación vendría a ser “-eno” en lugar de “-ano” según la IUPAC (Unión Internacional de Química Pura y Aplicada). Para poder nombrar de manera correcta a los alquenos se deben seguir ciertas reglas, mismas que son descritas a continuación:

Regla 1

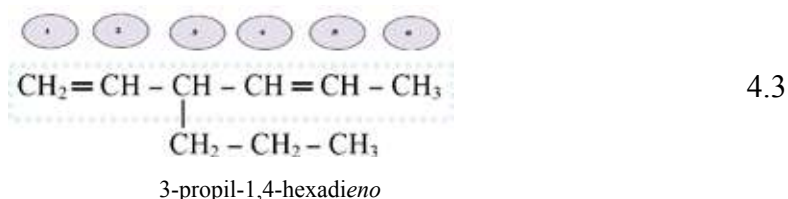
Como primera regla, Martínez Márquez (2012) señalan que es importante tener en cuenta que se debe escoger la cadena más larga que contenga en su interior los dobles enlaces; en los casos que existan ramificaciones en la cadena, es primordial escoger la cadena que contenga el mayor número de dobles enlaces, sin importar que ésta sea más corta, como se muestra a continuación:



4.2

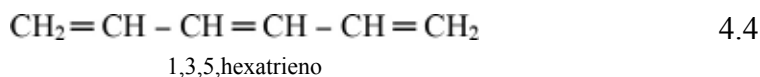
Regla 2

Como segundo punto, es necesario realizar la numeración de la cadena, por lo cual dicha numeración empieza por el carbono que esté más cerca al doble enlace dándole mayor prioridad al doble enlace, además de que el nombre del alqueno dependerá del número de carbonos que conforman la cadena más larga. (Martínez Márquez, 2012).



Regla 3

Existen casos donde el hidrocarburo está compuesto por más de un doble enlace, por lo que, en su nomenclatura se deben incorporar las terminaciones “-dieno”, “-trieno”, “-tetraeno”, “-pentaeno”, etc., dependiendo del número de dobles enlaces, además de escribir la posición que ocupan en la cadena. (Martínez Márquez, 2012).



Regla 4

En los alquenos, los grupos funcionales (alcoholes, aldehídos, cetonas, etc.) tienen mayor prioridad con respecto al doble enlace. (Rivera Álvarez, 2010).

En cuanto a la nomenclatura *cis* (Z) y *trans* (E), Ramírez Regalado (2016) indica que cuando dos radicales se encuentran en el mismo lado formando una especie de “balde”, el compuesto se llama isómero *cis*, mientras que si los radicales o sustituyentes están en lados opuestos formando una “silla”, el compuesto vendrá a ser llamado isómero *trans*, como mostramos a continuación:

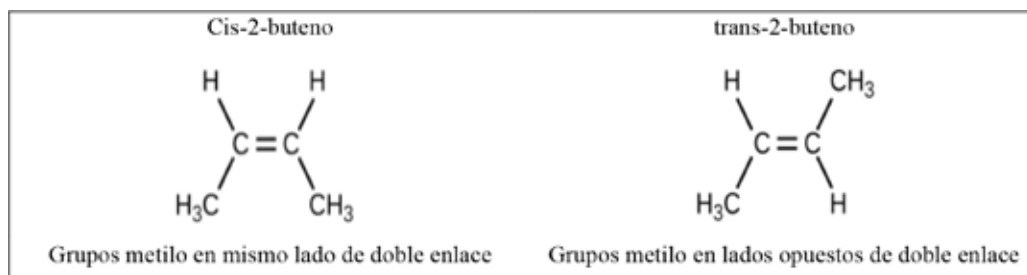


Figura 4.1. Isómeros cis-trans

4.2.3. Propiedades físicas

Dentro de las propiedades físicas, Martínez Márquez (2012), menciona que los alquenos son menos densos que el agua; con respecto a la solubilidad, los alquenos son insolubles en agua y solubles en solventes orgánicos. En los alquenos, los que poseen de 2 a 4 átomos de carbonos representan a los gases; mientras que los líquidos son representados por cadenas de 5 a 15 carbonos; y los sólidos son aquellos que tienen 16 carbonos o más en la cadena. Al hablar de los puntos de fusión y ebullición podemos decir que van aumentando a medida que se añaden carbonos en la cadena principal

Tabla 4.1. Propiedades físicas

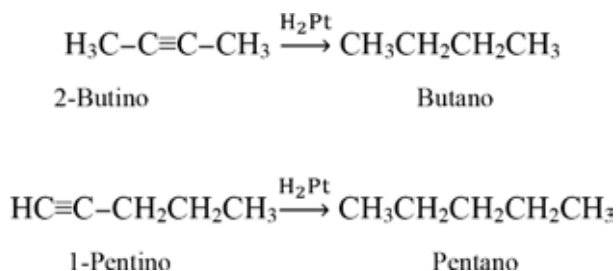
Nombre	Fórmula	Pf °C	Pe °C	Densidad relativa (a 20 °C)
Etileno	$\text{CH}_2=\text{CH}_2$	-169	-102	
Propileno	$\text{CH}_2=\text{CHCH}_3$	-185	-48	
1-Buteno	$\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{CH}_3$		-6,5	
1-Penteno	$\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$		30	0,643
1-Hexeno	$\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	-138	63,5	0,675
1-Hepteno	$\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$	-119	93	0,698
1-Octeno	$\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_5\text{CH}_3$	-104	122,5	0,716
1-Noneno	$\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_6\text{CH}_3$		146	0,731
1-Doceno	$\text{CH}_2=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3$	-87	171	0,743
* Observaciones: Pf = Punto de fusión; Pe = Punto de ebullición.				

4.2.4. Métodos de preparación

Preparación de alquenos en el laboratorio; los métodos más sencillos son la hidrogenación de alquino, deshidrohalogenación y deshidratación de alcoholes.

4.2.4.1. Hidrogenación de alquino

Los alquinos tienen la posibilidad de hidrogenar en las mismas condiciones empleadas para hidrogenar alquenos. Como catalizador se emplea platino o paladio Cabildo Miranda (2008)



4.5

4.2.4.2. Hidrogenación de alquinos a alquenos

El empleo de catalizadores modificados (Lindlar) permite parar la reacción en el alqueno. Cabildo Miranda (2008)

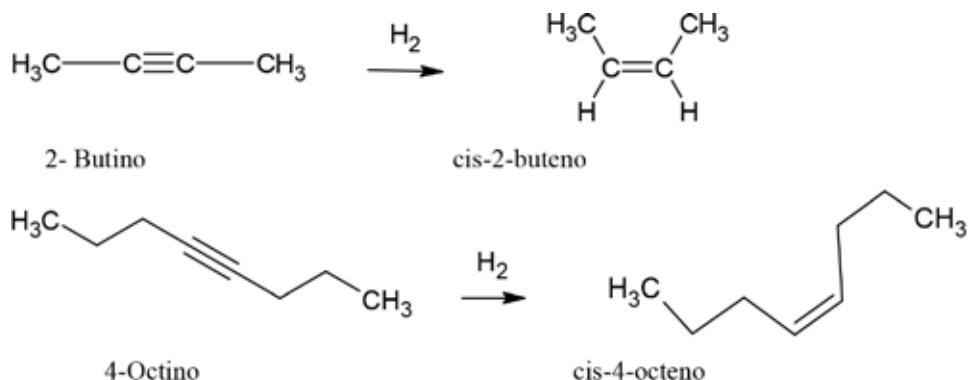
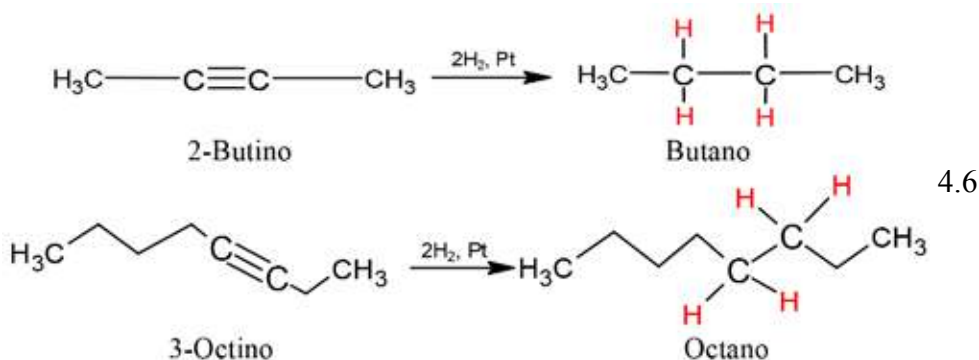


Figura 4.2. Hidrogenación de alquino

Las hidrogenaciones con el catalizador de Lindlar otorgan constantemente alquenos cis. Este catalizador está formado por paladio precipitado sobre carbonato de calcio y tratado con acetato de plomo y quinoleína Cabildo Miranda (2008)

Los catalizadores más utilizados son: platino, paladio.



La hidrogenación es una actitud exotérmica, y el calor desprendido se ve perjudicado por los sustituyentes del alquino. Así, los alquinos internos desprenden menos calor al hidrogenarse que los terminales, debido a su mayor estabilidad por el fenómeno de la hiperconjugación. Cabildo Miranda (2008)

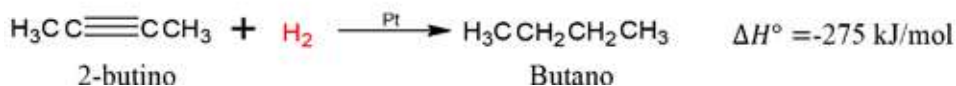
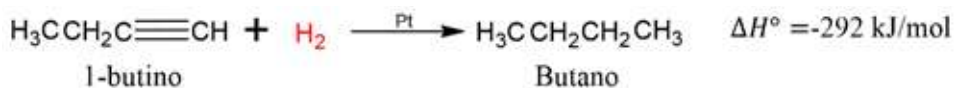
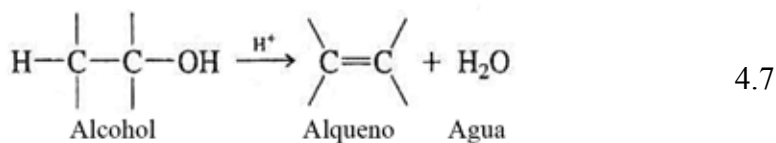


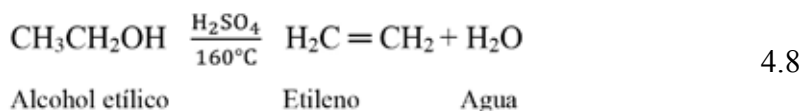
Figura 4.3. 1-buteno y 2-buteno

4.2.4.3. Deshidratación de alcoholes

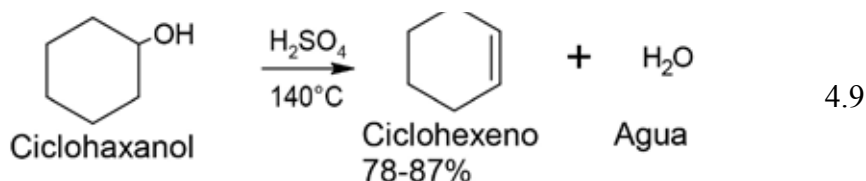
En la deshidratación de alcoholes, el H y el OH se pierden de carbonos adyacentes. Es necesario un catalizador ácido.



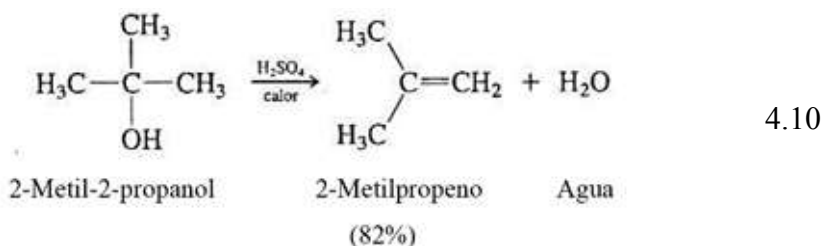
Antes de que la deshidrogenación del etano se convirtiera en el método dominante, el etileno se preparaba calentando alcohol etílico con ácido sulfúrico.



Otros alcoholes se comportan del mismo modo. Los alcoholes secundarios experimentan eliminación a temperaturas inferiores respecto a los alcoholes primarios.



Y, los alcoholes terciarios se deshidratan a temperaturas inferiores respecto a los alcoholes secundarios.



El ácido sulfúrico (H_2SO_4) y el ácido fosfórico (H_3PO_4) son los ácidos usados con más frecuencia en las deshidrataciones de los alcoholes. También se usa con frecuencia el hidrógeno sulfato de potasio (KHSO_4).

4.2.5. Isomería Geométrica

Para hablar de isomería de los alquenos, se debe tener en cuenta que los isómeros hacen referencia a los compuestos que poseen la misma fórmula condensada pero con diferente estructura, lo cual indica que también poseen propiedades distintas, por tanto, existen varios tipos de isomería para los hidrocarburos como: la isomería de cadena o también llamada estructural; la isomería de posición o de lugar, la isomería geométrica o también conocida como cis-trans; la isomería óptica o estereoisometría y la isomería funcional. (Ramírez Regalado, 2016)

Rivera Álvarez (2010) establece que en los alquenos está presente la isomería geométrica, por lo que se puede ver dos tipos de isomerías, las cuales son: isomería cis e isomería trans: cabe destacar que para que existan estos tipos de

isomería, los sustituyentes enlazados a los carbonos deben ser distintos, es decir que cuando en un alqueno están dos sustituyentes iguales unidos al carbono, el compuesto no presenta ningún tipo de isomería. La isomería cis: hace referencia a que los sustituyentes enlazados a los carbonos del doble enlace están ubicados en el plano, en una misma región del espacio (en el mismo lado); mientras que, al hablar de isomería trans: los sustituyentes enlazados a los carbonos unidos por el doble enlace se encuentran en regiones diferentes del espacio (lados opuestos), como podemos ver en el ejemplo a continuación:

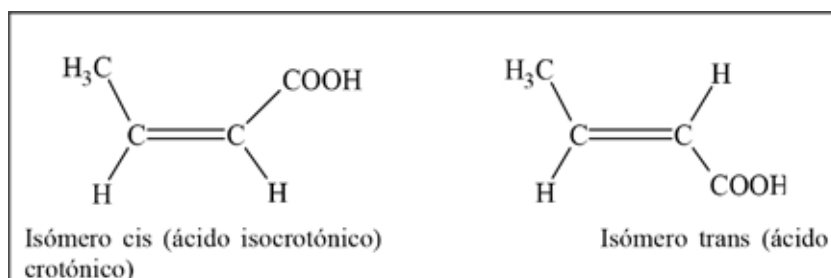


Figura 4.4. Isómeros geométricos para el compuesto $\text{CH}_3\text{-CH=CH-COOH}$

Además, podemos mencionar que este tipo de isomería cis y trans son representados por las letras del abecedario (Z) y (E) respectivamente, siendo ejemplos de los estereoisómeros, ya que este tipo de isómeros solo difieren en la orientación de sus átomos en el espacio, es decir que, presentan la misma estructura con distinta distribución espacial de los átomos de los compuestos o sustancias; no obstante, al hablar de los alquenos, los isómeros mencionados con anterioridad son estereoisómeros configuracionales, pues pueden interconvertirse (modificación de su orientación espacial, para convertirse en un isómero diferente de la misma molécula) solo por medio de una ruptura del enlace π presente en el doble enlace (Paredes, Yates, Zuluaga y Insuasty, 2011).

Para utilizar el sistema se debe tomar en cuenta que “cis-trans”: el método más simple para describir la isomería geométrica en alquenos o ciclos con dos sustituyentes idénticos. Se usa “cis” cuando los grupos idénticos están en el mis-

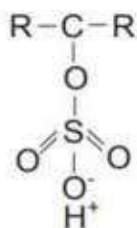
mo lado del doble enlace o ciclo, y “trans” cuando están en lados opuestos. Es adecuado solo cuando los sustituyentes son idénticos y su aplicación es limitada con sustituyentes diferentes (Wade, 2011).

Mientras que el sistema “E-Z”: Es un método más general y preciso, basado en las reglas de prioridad de Cahn-Ingold-Prelog, para describir isomería geométrica en moléculas con más de dos sustituyentes diferentes alrededor del doble enlace. “E” se usa cuando los grupos de mayor prioridad están en lados opuestos del doble enlace y “Z” cuando están en el mismo lado. El sistema “cis-trans” se aplica a compuestos con dos sustituyentes idénticos, mientras que el sistema “E-Z” es necesario para compuestos con cuatro sustituyentes diferentes o cuando no se puede usar el sistema “cis-trans” (Wade, 2011).

4.2.6. Mecanismos de reacción

4.2.6.1. Sulfatación

Las condiciones de alta concentración y baja temperatura permiten que el ácido sulfúrico se pueda adicionar a los alquenos produciendo de esta manera sulfatos de alquilo.



4.11

Posteriormente también lo podemos ver como la adición de un grupo $-\text{OSO}_2\text{OH}$ (sulfato ácido) en un ion carbonio estable. (Sierra, 2009)

Ejemplo

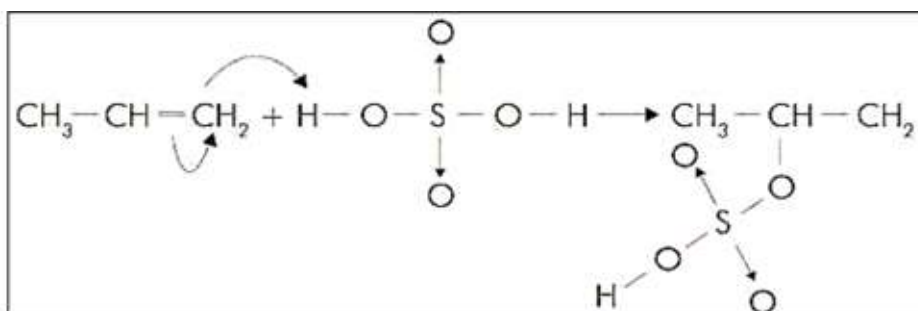


Figura 4.5. 2-sulfato ácido de isopropilo

La reacción empieza cuando un ion hidrógeno que actuará como electrófilo se une al carbón más estable del doble enlace y así formar el ion carbonio más estable.

Posteriormente el ion carbonio reaccionará con el ion sulfato ácido, el cual actuará como nucleófilo; de esta manera se formará el sulfato ácido de alquilo. (Sierra, 2009)

La sulfatación está limitada a reaccionar con compuestos con enlaces alofónicos, principalmente con alquenos, y algunos otros con grupos

4.2.6.2. Dimerización

La dimerización es una reacción de adición de un alqueno a otro alqueno para formar dímeros, y a medida que avanza la reacción formar polímeros. Esta reacción se da mediante la presencia de un catalizador ácido. En este caso, el ácido sulfúrico (H_2SO_4) o fosfórico (H_3PO_4) deben observar una temperatura adecuada de 80°C .

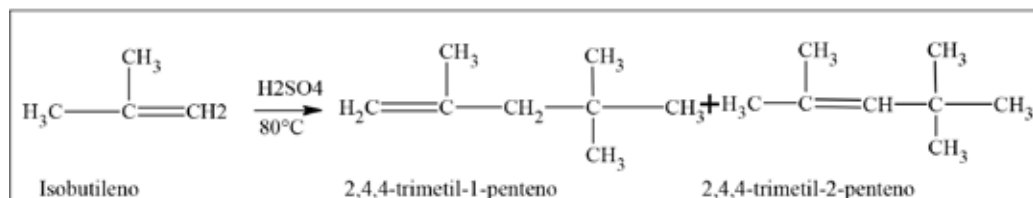


Figura 4.6. Reacción de dimerización

Los productos (otro alqueno) tendrán el doble de átomos de carbono e hidrógeno que el compuesto de partida, y por esa razón reciben el nombre de dímeros (SistemadeEstudiosMed, 2022)

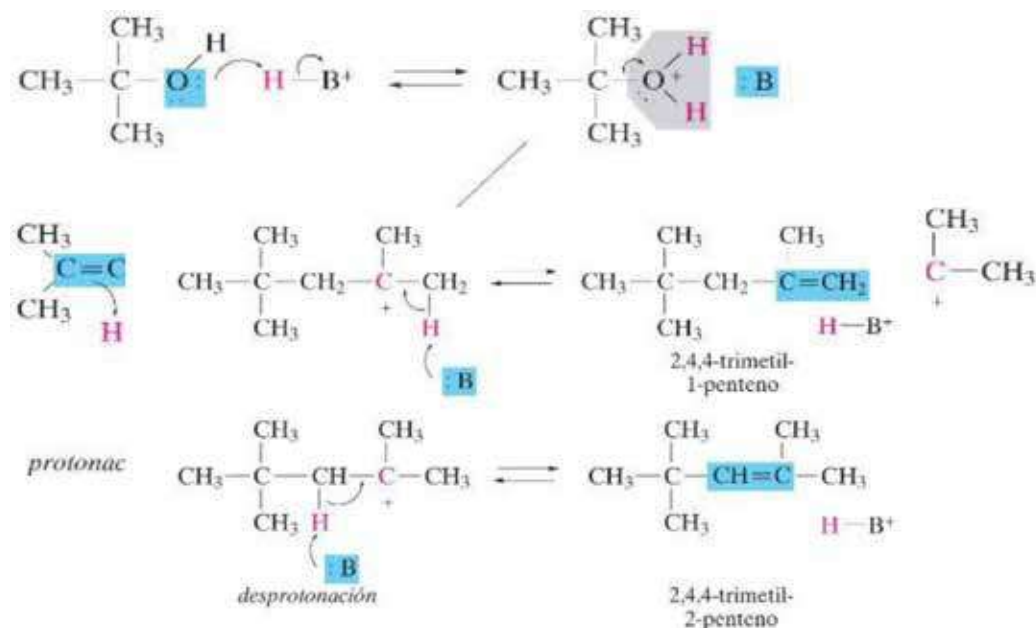


Figura 4.7. Mecanismo de reacción de dimerización

El mecanismo de reacción de la dimerización ocurre mediante la protonación del alqueno, el cual ataca al protón del ácido sulfúrico (H^+) formando el carbocatión más estable, para que este luego reaccione con el otro alqueno formando el catión dímero.

Una vez formado el catión dímero se inicia la deprotonación, donde se pierde un hidrógeno que regresa al ácido, y seguido se forman 2 productos dependiendo la posición del doble enlace.

Cabe destacar que, esta dimerización no tiene por qué frenar la reacción del alqueno como producto, pues pueden producirse más adiciones del isobutileno y con las condiciones adecuadas formar cadenas complejas de alquenos con un alto peso molecular. (Ege, 2008, p. 318)

4.2.4.1. Adición Electrofílica en Alquenos

- Ataque del Electrón π del Alqueno:

Los alquenos contienen un enlace doble (π) que es rico en electrones, lo que los hace reactivos frente a electrófilos (especies deficientes en electrones). En la primera etapa de la reacción, el enlace π ataca a un electrófilo, como un ion halógeno o cualquier otro electrófilo (Wade, 2011).

- Formación del Intermediario Carbocatiónico:

Como resultado del ataque del electrófilo, el doble enlace se rompe, y uno de los átomos de carbono del alqueno adquiere una carga positiva, formando un carbocatión. El otro átomo de carbono queda unido al electrófilo. La estabilidad del carbocatión juega un papel crucial aquí. Un carbocatión terciario es más estable que uno secundario o primario debido a la estabilización por efecto inductivo y resonante (Wade, 2011).

- Reordenamiento del Carbocatión (si es aplicable):

En ciertos casos, puede ocurrir un reordenamiento del carbocatión. Si un carbocatión más estable puede formarse por la migración de un grupo alquilo o un hidruro, esta etapa ocurre antes de que el nucleófilo ataque. Por ejemplo, un carbocatión secundario puede reordenarse a un carbocatión terciario si un grupo alquilo se desplaza para estabilizar la carga positiva (Wade, 2011).

- Ataque del Nucleófilo:

El nucleófilo, que puede ser un ion haluro (Br^- , Cl^-) o agua, ataca al carbocatión formado en el paso anterior, neutralizando la carga positiva y formando el producto final.



Figura 4.8. Mecanismo de adición electrofílica

4.2.6.3. Carbenos

Es uno de los principales intermedios de las reacciones orgánicas, junto a los carbocationes, carbaniones y los radicales libres. Estos carbenos mantienen una carga neutra y carbón divalente y la cual presenta 6 electrones en su capa de valencia (Fracaroli, 2009)

Lennard-Jones y Pople en el año de 1951 con ayuda de la mecánica cuántica evidencian la presencia de dos estados basales para los carbenos metilénicos, los cuales dependiendo del estado de espín de dos electrones habrá dos tipos de carbenos, el carbeno singlete y triplete (Rodríguez, (2019)

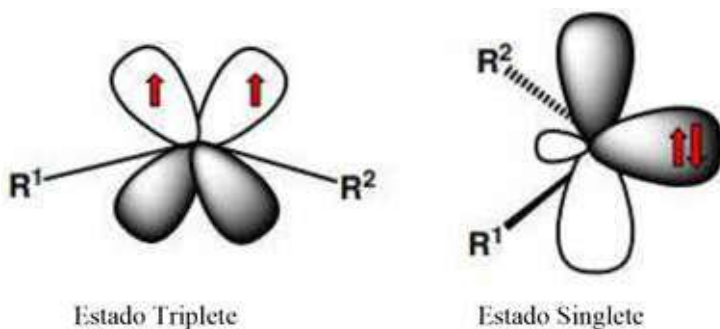


Figura 4.9. Representación de los estados de basales de los carbenos

En lo que respecta el carbeno en estado singlete, estos presentarán dos electrones no enlazados contenidos en un orbital sp^2 , además de un orbital vacío (p). Por otro lado, los carbenos en estado triplete contienen los dos electrones desapareados, uno en un orbital sp^2 y el otro electrón en un orbital p . (Sierra, 2009)

El carbeno en estado singlete forma ángulos de enlace entre $100-100^\circ$. El orbital vacío p actúa como electrofílico mientras que el par de electrones apareados es nucleofílico. En cambio, el carbeno en estado triplete presenta ángulos de enlace entre $130-150^\circ$. (Rodríguez, 2019)

La obtención de un carbeno se da mediante la presencia de una base fuerte para sustraer un protón del cloroformo ($CHCl_3$) o el bromoformo ($CHBr_3$) y así obtener un carbanión estabilizado. En caso de la presencia de un bromoformo, el carbanión expulsará un ion bromuro para producir el dibromocarbene. (Sierra, 2009)

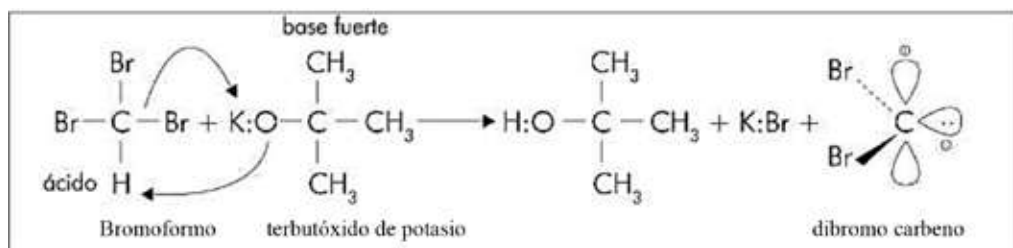


Figura 4.10. Dibromocarbene

Este intermediario carbeno se adiciona a un alqueno, y cuando lo hace interactúa con el doble enlace formando un cicloalcano.

4.2.7. Preparación de epóxidos

Los alquenos son fáciles de oxidar por una gran cantidad de compuestos como: KMnO_4 , O_3 , OsO_4 , etc. De manera general, las reacciones de oxidación en el doble enlace se dividen en dos partes: la oxidación del enlace pi sin ruptura del enlace sigma, y por otro lado se da la ruptura del enlace sigma acompañado de la oxidación del enlace pi. En el caso de los epóxidos pertenecen al grupo donde no ocurre la ruptura del enlace sigma. (Miranda, 2008)

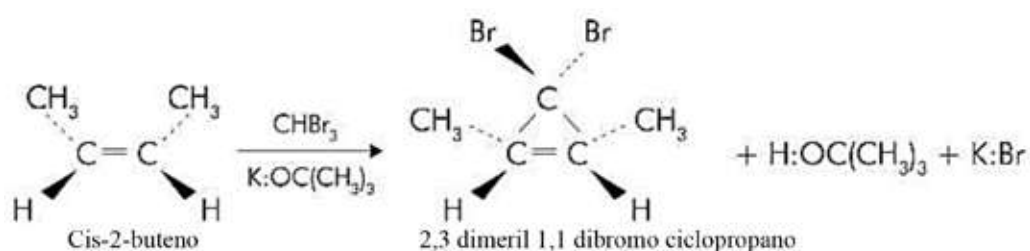
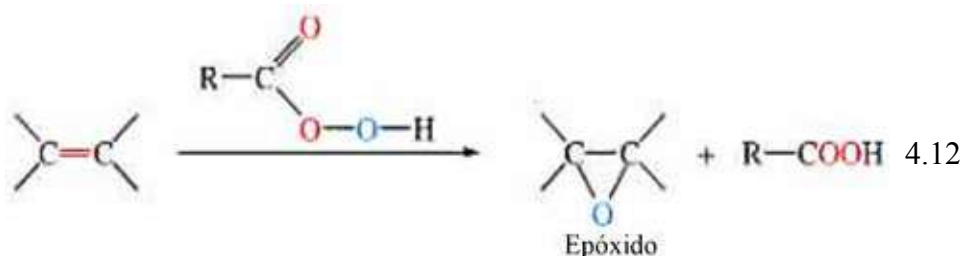


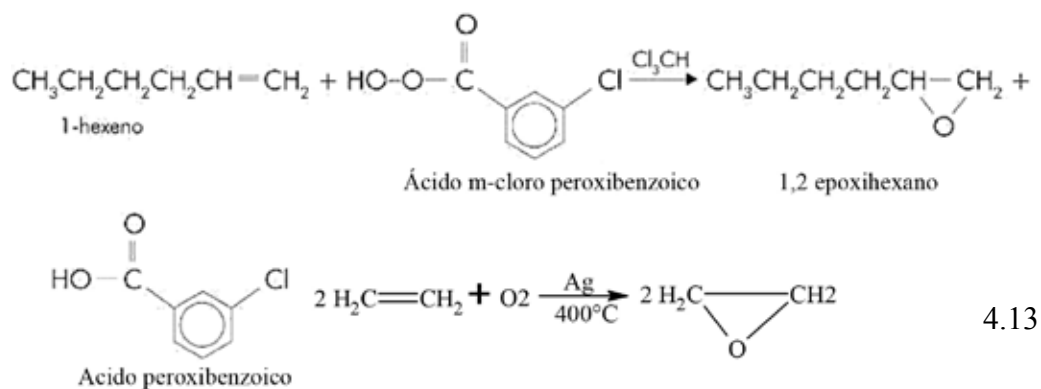
Figura 4.11. Oxidación de etileno

La formación del epóxido se da mediante peroxiácidos orgánicos (R-COOOH), la cual en su molécula contienen el grupo peróxido ($-\text{O}-\text{O}-\text{H}$) que será quién actúe como oxidante (Miranda, 2008).

Uno de los epóxidos más importante es el óxido de etileno, el cual se prepara industrialmente a través de una oxidación directa del etileno a una temperatura de 400°C usando como catalizador la plata (Paredes, Yates y Zuluaga, 2011).



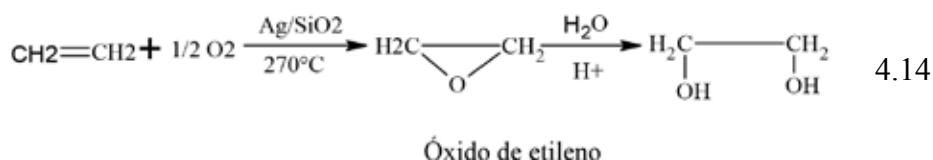
Para la obtención de un epóxido a partir de un alqueno, tenemos el siguiente ejemplo: preparación del 1,2 epoxi hexano la reacción del 1-hexeno y del ácido m-cloro peroxibenzoico (Sierra, 2009)



4.2.8. Preparación de glicoles

Aquellos compuestos que contienen dos grupos de oxidrilo en átomos de carbono diferentes se los conocen como glicoles. La característica de los glicoles es que, gracias a la presencia de los dos grupos – OH, facilita el desarrollo de enlaces de hidrógeno en una mayor cantidad que los monos hidroxilados, confiéndole características de viscosidad, un elevado punto de ebullición y solubilidad en el agua. Y uno de los glicoles de mayor importancia es el etilenglicol, el cual actúa como anticongelante no inflamable para radiadores de carros y aviones (Autino, Romanelli y Ruiz, 2013)

En lo que respecta cómo reacciona un glicol con un alqueno, tenemos de ejemplo la preparación del denominado etilenglicol. Dicho compuesto se crea industrialmente, por la oxidación catalítica del etileno con aire formando óxido de etileno, el cual y posteriormente se hidroliza para producir el glicol (Paredes, Yates y Zuluaga, 2011).



4.3. POLIMERIZACIÓN

La polimerización de alquenos es un proceso químico en el cual los monómeros de alquenos se unen entre sí para formar cadenas largas y ramificadas conocidas como polímeros. Esta reacción se lleva a cabo mediante la ruptura de la doble ligadura carbono-carbono del alqueno y la formación de nuevos enlaces covalentes.

4.3.1. Aplicaciones

Puesto que el enlace doble carbono-carbono se transforma muy fácilmente en demás grupos funcionales de gran relevancia, los alquenos son mediadores muy relevantes en la síntesis de medicamentos, pesticidas, polímeros y otros productos químicos muy relevantes Wade (2011).

El compuesto orgánico de mayor relevancia y que se produce en mayor volumen es el etileno; se llega a producir en un aproximado de 160 mil millones de libras al año, y esto a nivel global. Del etileno se adquiere el polietileno, es así que se polimeriza la mayor cantidad de etileno para poder desarrollar 90 mil millones de libras de este compuesto llamado polietileno. La cantidad sobrante es aprovechada para la síntesis de un sin número de productos químicos de origen

orgánico como, por ejemplo: cloruro de vinilo, etilenglicol, ácido acético y etanol Wade (2011).

- El uso más importante de los alquenos es en la industria de plásticos como materia prima para la elaboración de plásticos.
- El polietileno es un compuesto utilizado en la fabricación de envolturas, recipiente, fibras, moldes, etc.
- El etileno es utilizado en la maduración de frutos verdes como piñas y tomates lo utilizan en la industria de la agrícola. En la antigüedad se utilizó como anestésico (mezclado con oxígeno” y en la fabricación del gas mostaza (usado como gas de combate).
- El propeno (nombre común propileno”, se usa para elaborar polipropileno y otros plásticos, como alcohol isopropílico (para fricciones” y otros productos químicos.
- Varias feromonas u hormonas sexuales de insectos, son alquenos.
- Los carotenos y la vitamina A, constituyentes de los vegetales amarillos como la zanahoria, y que son utilizados por los bastoncillos visuales de los ojos, también son alquenos.
- Fundamentales en el desarrollo de herramientas para la industria de la construcción.



Figura 4.12. Fabricación de diferentes productos plásticos

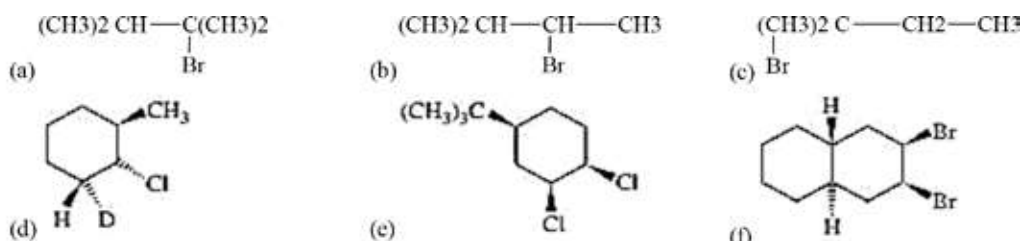
4.4. PROBLEMAS PROPUESTOS

1. Muestre cómo prepararía ciclopenteno a partir de cada compuesto.
 - a) trans-1,2-dibromociclopentano
 - b) ciclopentanol c) bromuro de ciclopentilo
 - d) ciclopentano (no por deshidrogenación)

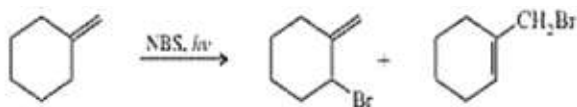
2. En la deshidrohalogenación de los haluros de alquilo, una base fuerte como el ter-butóxido en general produce mejores resultados a través del mecanismo E2.
 - a) Explique por qué una base fuerte como el ter-butóxido no puede deshidratar un alcohol a través del mecanismo E2.
 - b) Explique por qué un ácido fuerte, utilizado en la deshidratación de un alcohol, no es efectivo en la deshidrohalogenación de un haluro de alquilo.

3. Prediga los productos principales de la deshidratación de los siguientes alcoholes, catalizada con un ácido.
 - (a) pentan-2-ol
 - (b) 1-metilciclopentanol
 - (c) 2-metilciclohexanol
 - (d) 2,2-dimetilpropan-1-ol

4. Prediga los productos de la deshidrohalogenación, cuando los siguientes haluros de alquilo se calientan en potasa alcohólica. Cuando se forme más de un producto, prediga el producto principal y los productos secundarios



5. Proponga un mecanismo que explique la formación de los dos productos de la siguiente reacción.



6. Cuando el 2-bromo-3-fenilbutano reacciona con metóxido de sodio, se forman dos alquenos (por eliminación E2). El producto de Zaitsev predomina.
- Dibuje la reacción, mostrando los productos principal y secundario.
 - Cuando un estereoisómero puro del 2-bromo-3-fenilbutano reacciona, se forma un estereoisómero puro del producto principal. Por ejemplo, cuando reacciona el (2R,3R)-2-bromo-3-fenilbutano, el producto es el estereoisómero con el grupo metilo cis. Utilice sus modelos para dibujar una proyección de Newman del estado de transición para mostrar por qué se observa esta estereoespecificidad.
 - Utilice una proyección de Newman del estado de transición para predecir el producto principal de eliminación del (2R,3S)-2-bromo-3-fenilbutano.
 - Prediga el producto principal a partir de la eliminación del (2S,3S)-2-bromo-3-fenilbutano. Esta predicción puede hacerse sin dibujar ninguna estructura, considerando los resultados del inciso.

CAPÍTULO V. ALQUINOS O ACETILENOS

5.1. INTRODUCCIÓN

La Química Orgánica estudia una enorme cantidad de moléculas las cuales, en su gran mayoría, por no decir todas, contienen carbono; y, debido a la abrumadora presencia de este elemento se le considera la química del carbono.

Los alquinos tienen gran relación con la química orgánica, y es que son una parte de ésta, ya que son compuestos que están formados por carbono, siendo a su vez hidrocarburos, es decir, son compuestos que básicamente están formados por átomos de carbono e hidrógeno, pero con la característica de que estos cuentan con al menos un triple enlace entre dos átomos de carbono. Los hidrocarburos se dividen en dos tipos: los hidrocarburos alifáticos y aromáticos, los alquinos son hidrocarburos alifáticos. (Fernandez, 2009)

Por lo tanto, los alquinos son hidrocarburos que contienen al menos un triple enlace carbono-carbono, cuya fórmula molecular general es C_nH_{2n-2} y su grado de insaturación es dos. Son compuestos ácidos estables debido a la alta energía de su triple enlace carbono-carbono. El alquino más sencillo es el etino (C_2H_2), y también se le conoce como acetileno Equipo Editorial. (Lifeder, 2022)

La característica de estos compuestos es que los alquinos a diferencia de los alcanos y los alquenos son generalmente lineales y ramificados. Los alquinos cíclicos son muy inestables y por lo tanto muy raros; esto es debido a la presencia del enlace triple. (Hernandez, 2017)

Los alquinos son inusuales en naturaleza, sin embargo, algunas plantas elaboran alquinos como protección contra depredadores, un ejemplo de alquino que se encuentra en la planta es la cicutoxina que viene a ser un compuesto tóxico que se encuentra en la cicuta y en la capilina; evita que las enfermedades producidas por hongos dañen a la planta; en los medicamentos un ejemplo es el etinil-es-

tradiol (una hormona femenina sintética) que es un ingrediente habitual de las píldoras anticonceptivas. (Hernandez, 2017)

El triple enlace que exhibe tiene propiedades similares al doble enlace, por lo que sufre las mismas reacciones que el alqueno, pero es mucho más reactivo. El triple enlace impide la libre rotación de la molécula. (Fernández, 2011)

En el presente trabajo de investigación se expondrán de una manera más detallada sobre este grupo de hidrocarburos; se hará una revisión sobre su estructura, características, propiedades físicas y químicas; se indagará además sobre los métodos mediante los cuales se puede obtener algunos de estos compuestos, las reacciones químicas que pueden presentarse; por último, se examinará brevemente acerca de su distintiva característica de acidez, finalmente mencionando algunos aspectos que constituyen la importancia de los alquinos tanto a nivel industrial como comercial.

5.2. ESTRUCTURA, NOMENCLATURA Y PROPIEDADES FÍSICAS

5.2.1. Estructura

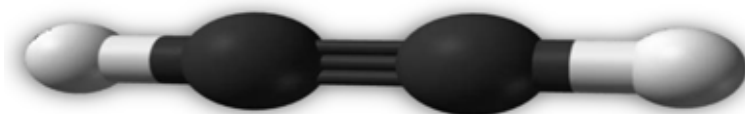


Figura 5.1. Molécula de acetileno

Una molécula de acetileno como la que se muestra en la imagen. A partir de esto, es muy posible poder observar de una manera clara la geometría lineal del enlace $-C \equiv C-$. Entonces donde hay enlace triple, la estructura de la molécula debe ser lineal. Esta es una de las diferencias más notables entre ellos y el resto

de los hidrocarburos. En los alquinos la hibridación orbital es sp , es decir, que tienen 50 % de carácter s y 50 % de carácter p . Son dos orbitales híbridos sp los que se enlazan a los átomos de H en el acetileno o a los grupos alquílicos en los alquinos. (Editorial Lifeder, 2022).

La distancia que los separa a ambos H o R es de 180° , además que es el único modo que los orbitales p puros de los carbonos pueden hacer la formación del enlace triple. Por esta razón el enlace $-C\equiv C-$ es lineal. Viendo la estructura de cualquier molécula el $-C\equiv C-$ resalta en aquellas regiones donde el esqueleto es muy lineal (Equipo Editorial Lifeder, 2022).

5.2.2. Nomenclatura

Los alquinos a menudo se conocen por sus nombres comunes; estos nombres comunes son derivados del alquino más simple, acetileno. Bajo el sistema de nombres comunes, los dos grupos R se nombran como sustituyentes del acetileno (la figura 4.1 muestra algunos ejemplos). (Weininger, 2008. p. 1115)

Un alquino con dos grupos metilo sería dimetil acetileno, un alquino con dos grupos isopropilo, diisopropil acetileno, y así sucesivamente (Weininger, 2008).

Alquino	$HC\equiv CH$	$CH_3-C\equiv C-CH_3$	$CH_3-\underset{\underset{CH_3}{ }}{CH}-C\equiv C-\underset{\underset{CH_3}{ }}{CH}-CH_3$
Nombre IUPAC	Etino	2-butino	2,5-dimetil-3-hexino
Nombre Común	Acetileno	Dimetil acetileno	Diisopropil acetileno

Figura 5.2. Representación de los alquinos

5.2.3. Propiedades físicas

- Son insolubles en agua, pero bastante solubles en disolventes orgánicos usuales y de baja polaridad: ligroína, éter, benceno, tetracloruro de carbono.
- Son menos densos que el agua y sus puntos de ebullición muestran el aumento usual con el incremento del número de carbonos y el efecto habitual de ramificación de las cadenas.
- Los puntos de ebullición son casi los mismos que para los alcanos o alquenos con el mismo esqueleto carbonado.
- Los tres primeros términos son gases; los demás son líquidos o sólidos.
- A medida que aumenta el peso molecular aumentan la densidad, el punto de fusión y el punto de ebullición.
- Los acetilenos son compuestos de baja polaridad, por lo cual sus propiedades físicas son muy semejantes a la de los alquenos y alcanos.
- Son inflamables. (Fernandez, 2009)

Tabla 5.1. Propiedades físicas de alquinos seleccionados

Nombre	Estructura	Pf (°C)	Pe (°C)	Densidad (g/cm ³)
Etino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	-82	-84	0,62
Propino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_3$	-101	-23	0,67
But-1-ino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_3$	-126	8	0,67
But-2-ino	$\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_3$	-32	27	0,69
Pent-1-ino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	-90	40	0,70
Pent-2-ino	$\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_3$	-101	55	0,71
3-metilbt-1-ino	$\text{CH}_3-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$		28	0,67
Hex-1-ino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-(\text{CH}_2)_3-\text{CH}_3$	-132	71	0,72
Hex-2-ino	$\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	-90	84	0,73
Hex-3-ino	$\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_3$	-101	82	0,73
3,3-dimetilbut-1-ino	$(\text{CH}_3)_3\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	-81	38	0,67
Hept-1-ino	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$	-81	100	0,73

Oct-1-ino	$\text{H-C}\equiv\text{C}-(\text{CH}_2)_5\text{CH}_3$	-79	125	0,75
Non-1-ino	$\text{H-C}\equiv\text{C}-(\text{CH}_2)_6\text{CH}_3$	-50	151	0,76
Dec-1-ino	$\text{H-C}\equiv\text{C}-(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3$	-36	174	0,77
* Observaciones: Pf = Punto de fusión; Pe = Punto de ebullición.				

5.2.4. Métodos de preparación

Dentro de las industrias se trabaja a gran escala. Los químicos buscan preparar el mismo compuesto reiteradamente, por lo que resulta oportuno obtener métodos que permitan ser aplicados a todos los componentes de determinados grupos químicos (Gómez, Domínguez y Márquez, 2009)

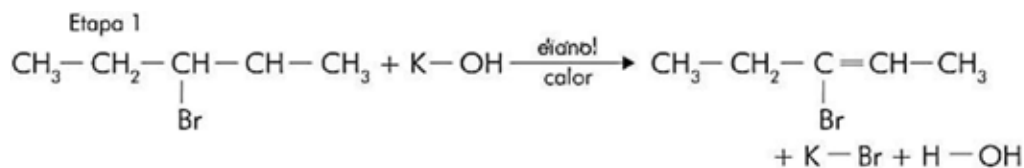
A continuación, se presentan diversos métodos que pueden ser aplicados a la familia de los alquinos:

5.2.4.1. Deshidrohalogenación de halogenuros

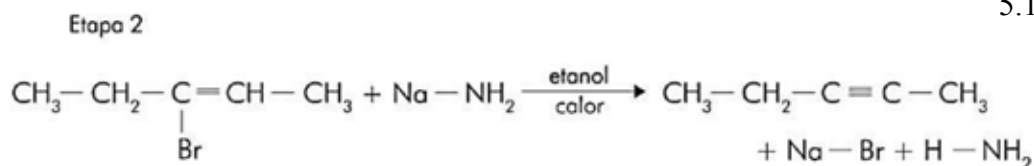
Paredes, Yates y Zuluaga (2009) afirman:

El mejor método de preparación de un alquino, es la eliminación de dos moléculas de haluro de hidrógeno de un di halogenuro de alquilo. Esta reacción requiere dos etapas: primero, calentamiento con una solución alcohólica de hidróxido de potasio para producir el halogenuro vinílico; segundo, tratamiento de este halogenuro con una base más fuerte como la amida de sodio. (p. 178).

Según Gómez Sierra, Clicerio Domínguez Sánchez y Márquez Nuño (2009), en una molécula los triples enlaces se forman de manera similar a la de los dobles enlaces. Por lo que, en el procedimiento se eliminan primero los cuatro átomos de dos carbonos adyacentes; y para la segunda eliminación se requiere una base más fuerte que el hidróxido de potasio (que en comparación se aplica para los alquenos), por lo que se recurre al amido de sodio (NH_2Na), que es una base más fuerte que el hidróxido de sodio.



5.1



A su vez, Gómez Sierra, Clicerio Domínguez Sánchez y Márquez Nuño (2009) mencionan que este método no es tan efectivo tal como en el caso de los alquenos. Esto debido a que se puede utilizar una base fuerte, pero esta va a provocar un desplazamiento del triple enlace al centro de la molécula, por lo tanto, el ión hidroxilo únicamente se podrá utilizar en casos en los que la migración no se lleve a cabo o que no tenga importancia.

Este método consiste en la eliminación de dos moléculas de haluro de hidrógeno (HX) de un dihaluro vecinal (un compuesto en el que dos átomos de halógeno están unidos a carbonos adyacentes), para formar un alquino.

Primera Eliminación (E2): En la primera etapa, se elimina un haluro de hidrógeno para formar un alqueno como producto intermedio. Esto generalmente ocurre en condiciones fuertemente básicas, con un reactivo como el hidróxido de sodio (NaOH) o un alcóxido.

El mecanismo es de eliminación bimolecular (E2), donde la base sustrae un protón de un carbono adyacente al halógeno, mientras que simultáneamente el halógeno es expulsado, formando un enlace doble entre los carbonos. Se necesita una base fuerte como el hidróxido de sodio en un solvente como etanol (Wade, 2011).

Segunda Eliminación (E2): En la segunda etapa, el alqueno intermedio experimenta una segunda reacción de eliminación para formar el alquino. Nuevamente, la base fuerte sustrae un protón de un carbono adyacente al segundo halógeno, eliminando otro haluro de hidrógeno HX y creando el triple enlace entre los carbonos. En esta etapa, se suele usar condiciones más drásticas (temperatura elevada y una base más fuerte, como NaNH₂ en amoníaco líquido) (Wade, 2011).

Un ejemplo de este método de preparación de alquinos puede ser:

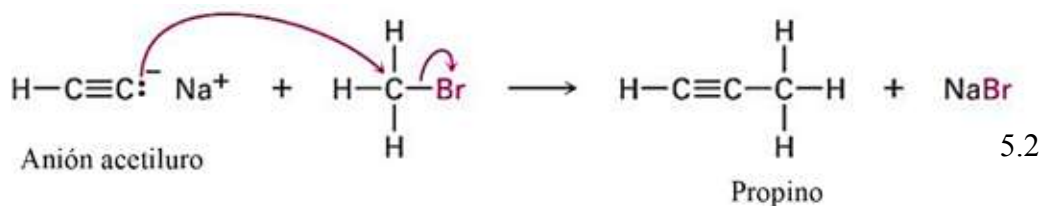


Figura 5.3. Preparación de alquinos

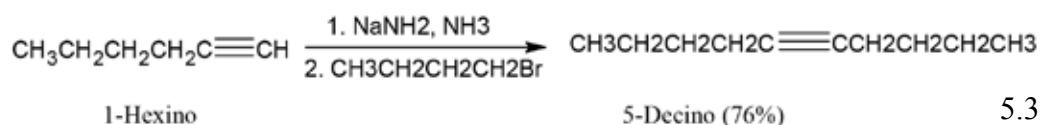
5.2.5. Alquilación de acetiluros

Otro de los métodos para la preparación de alquinos consiste en el método de alquilación con el anión acetiluro. Gómez, Domínguez y Márquez (2009) mencionan: “El anión acetiluro se forma mediante la reacción del acetileno con sodamida debido a la acidez que presentan los hidrógenos acetilénicos”. En cuanto a la reacción de estos aniones, McMurry (2012) menciona:

La carga negativa y el par de electrones sin compartir en el carbono hacen que un anión acetiluro sea fuertemente nucleofílico. Como resultado, un anión acetiluro puede reaccionar con electrófilos, como los halogenuros de alquilo, en un proceso que reemplaza el halogenuro para producir un nuevo alquino. El ion acetiluro nucleofílico utiliza un par de electrones para formar un enlace con el átomo de carbono electrofílico polarizado positivamente del bromo metano. A medida que se forma el nuevo enlace C-C, se retira el Br, llevándose el par de electrones del enlace C-Br formado y se obtiene propino como producto. A esta reacción la llamamos alquilación debido a que se ha unido un nuevo grupo alquilo al alquino inicial. (p. 327)

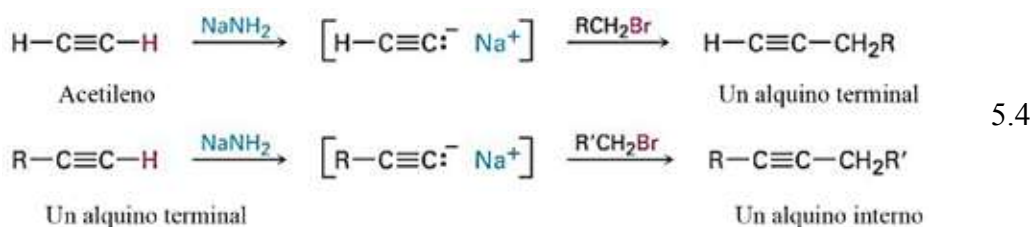


A parte de ello, McMurry (2012) menciona que “la alquilación de alquinos no se limita al acetileno. Cualquier alquino terminal puede convertirse en su anión correspondiente y alquilarse a través del tratamiento con un halogenuro de alquilo, produciendo un alquino interno”. Por ejemplo, la alquilación del 1-hexino, la cual consiste en transformarlo primero en su anión para posteriormente reaccionar el 1-bromobutano, dando como producto el 5-decino:



Asimismo, McMurry (2012) afirma que:

Debido a su generalidad, la alquilación de acetiluro es un método excelente para la preparación de alquinos sustituidos a partir de precursores más sencillos. Puede prepararse un alquino terminal alquilando el acetileno y también puede prepararse un alquino interno alquilando un alquino terminal. (p. 328)



Finalmente, en lo que respecta a este método de obtención de alquinos es relevante mencionar que al igual que los demás métodos, en este también existen limitaciones; de acuerdo a esto, según McMurry (2012):

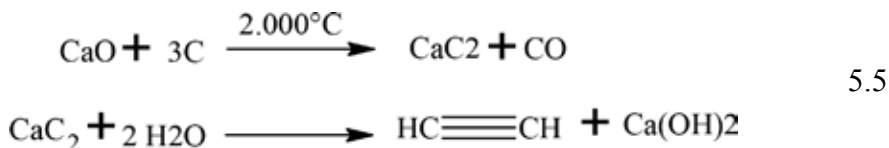
La reacción de alquilación se limita al uso de bromuros y yoduros de alquilo primarios, debido a que los iones acetiluro son bases lo suficientemente fuertes para causar eliminación en lugar de sustitución cuando reaccionan con halogenuros de alquilo secundarios y terciarios. (p. 328)

5.2.6. Obtención del acetileno

Por último, otro de los métodos de preparación de alquinos que se mencionará es la síntesis de un compuesto de gran importancia de esta familia tal como lo es el acetileno. “El acetileno, es el único de los alquinos que se prepara industrialmente en grandes cantidades y es de gran utilidad en la industria química” (Paredes, Yates y Zuluaga, 2009). Es por ello que se constituye como un método de gran utilidad, así como su producto. Según (Cabildo, García, López y Santa María, 2008): “La importancia del acetileno radica en su utilización como materia prima para la preparación de una gran variedad de compuestos orgánicos tales como ácido acético, ácido acrílico, acrilato de metilo, etc., utilizados para la fabricación de plásticos y caucho sintético” (p. 374).

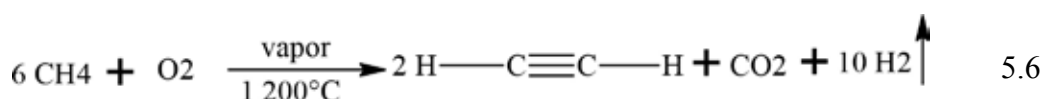
Con respecto al procedimiento para su obtención, Paredes, Yates y Zuluaga (2009) afirman:

Básicamente hay 2 métodos para prepararlo industrialmente: el primero y el más antiguo, consiste en reaccionar carbón con cal viva en un horno eléctrico a una temperatura de unos 2000 °C, para producir el llamado carburo de calcio (CaC_2), el cual al reaccionar



Este método tiene tanto ventajas como desventajas; según Paredes, Yates y Zuluaga (2009) su comercialización está sujeta a la materia prima que se precisa, la cual siendo económica permite una mayor productividad; sin embargo, los hornos en los que se llevan a cabo requieren una gran cantidad de energía para funcionar, siendo esta su desventaja.

El segundo método consiste en pirolizar hidrocarburos o gas natural para producir acetileno. Existen varios procesos de pirólisis, casi todos desarrollados en Alemania. En uno de ellos, el llamado proceso Sachse, consiste en quemar parte del metano para elevar la temperatura, hasta obtener las condiciones de pirólisis requerida (Paredes et al., 2017).



Finalmente, en lo que respecta a este método de obtención del acetileno es relevante mencionar que:

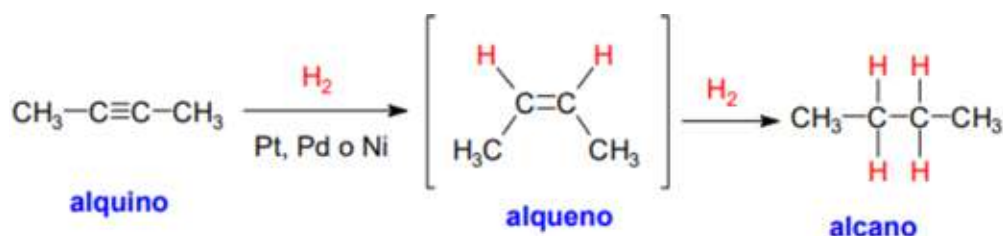
El acetileno se usa comercialmente como combustible y como materia prima para la producción industrial de un gran número de compuestos orgánicos importantes. Como combustible se utiliza principalmente para soldadura, corte y limpieza de hierro y acero; para lo cual se emplea la llama oxiacetilénica (originada por la combustión completa del acetileno en oxígeno) cuya temperatura es de 2800 °C. También se utiliza la llama para originar la luz de lámparas, boyas, etc. La disponibilidad, el bajo costo y alta reactividad del acetileno, lo han convertido en materia prima ideal para la producción de un gran número de materiales importantes (Paredes et al., 2017).

En la Formación del acetiluro se requiere una base fuerte (NaNH_2) en amoníaco líquido o en condiciones anhidras para desprotonar el alquino terminal (un alquino con un átomo de hidrógeno unido a uno de los carbonos del triple enlace) reacciona con una base fuerte, como el amoníaco sódico (NaNH_2), para formar el acetiluro sódico (McMurry, 2012).

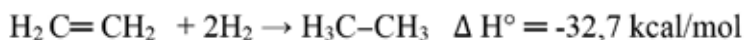
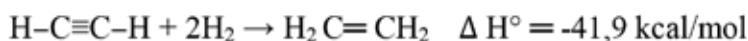
5.2.7. Mecanismos de Reacción

5.2.7.1. Hidrogenación sin: obtención de alquenos cis.

En presencia de catalizadores metálicos activos como platino (Pt), paladio (Pd) o níquel (Ni), los alquinos, por medio del que corresponde alqueno, se transforman en alcanos.

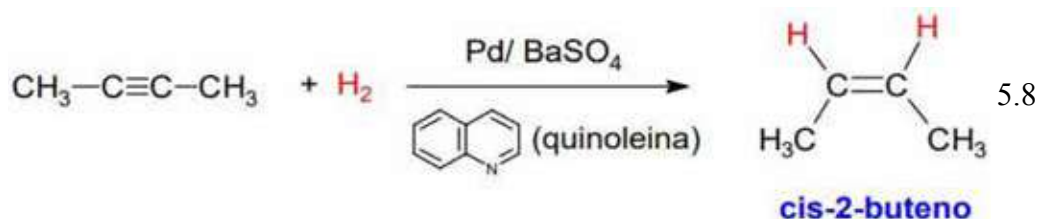


El primer paso en la hidrogenación de alquenos es más exotérmico que el segundo paso que nos permite detener la hidrogenación del alqueno paso a paso de los alquenos si se utilizan catalizadores débiles.

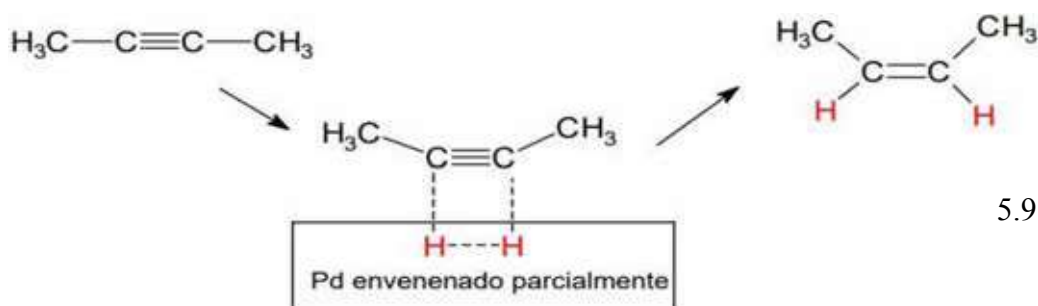


5.7

Uno de los catalizadores más utilizados para realizar la conversión de un alquino en un alqueno se le da el nombre de catalizador de Lindlar. Reacción paladio sobre sulfato de bario, seguido de la adición de acetato de plomo ($\text{Pb}(\text{OAc})_2$) y quinoleína. Este tratamiento da inactividad parcialmente el catalizador y permite la conversión selectiva de alquinos en alquenos Química Orgánica, (2019).



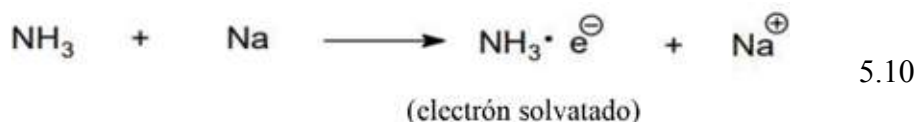
La hidrogenación de alquinos es muy similar a la hidrogenación de alquenos, debido a que ambos se crean usando estereokuímica.



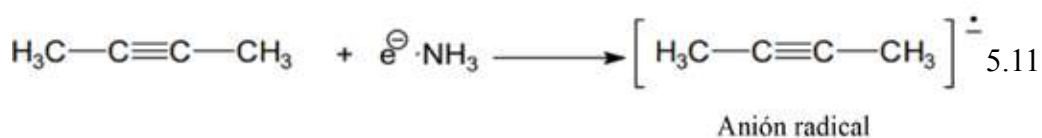
5.2.7.2. Hidrogenación anti: obtención de alquenos trans

Un alquino puede transformarse en un alqueno trans por reducción con Na metálico disuelto en NH₃ líquido. El NH₃ es un gas con un punto de ebullición de -33 °C sin embargo este permanece líquido si el recipiente de reacción se enfría a -78 °C. Esta temperatura se puede alcanzar al saturar metanol o acetona con hielo seco (CO₂ sólido).

Una vez que el Na se disuelve en amoníaco líquido se oxida dando origen al catión Na⁺ y a un electrón. La solución es de un color azul oscuro esto ocurre debido que existe la presencia de electrones solvatados.

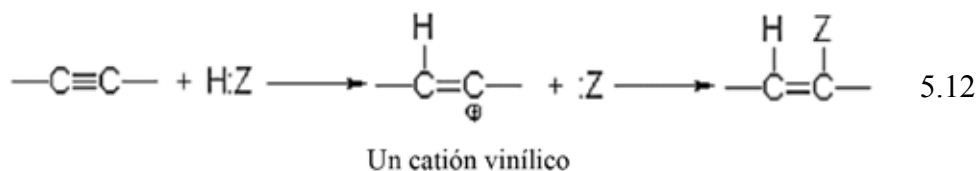


A un electrón solvatado por el amoníaco añadiendo un enlace triple para que con ello nos diera origen a una sustancia química que tenga cargada negativamente y que contenga un número impar de electrones (un anión radical):



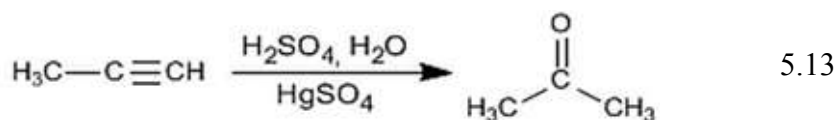
5.2.7.3. Adición de ácido

La adición de ácidos como los halogenuros de hidrógeno es electrofílica, parece seguir el mismo mecanismo con los denominados alquinos, al igual que los alquenos; es decir, a través de un carbocatión intermediario. La diferencia estriba en que ahora el intermediario es un catión vinílico.

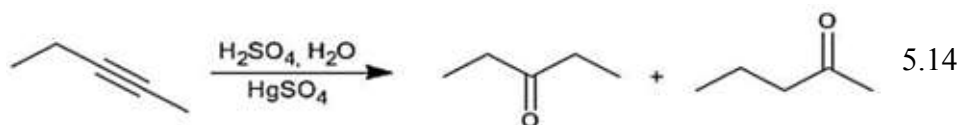


5.2.7.4. Adición de agua

Adición de agua a un alquino es una reacción de Markovnikov, la que misma que inicia con el ataque de enlace triple en un protón, dando origen a un carbocatión el mismo que es atacado por el agua. El enol ya formado se tautomeriza en un compuesto carbonílico.



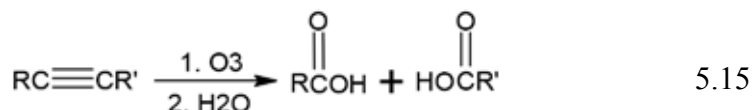
Los alquinos internos y no simétricos generan mezclas de dos cetonas al hidratarlos (Fernández, 2011)



5.2.7.5. Ozonólisis

En la ozonólisis, los alquinos reaccionan con el ozono y esto hace que se produzca la ruptura del enlace triple, y con ello dándonos el origen del resultado de un anhídrido que con la presencia de agua se hidroliza para que con ello nos dé un resultado formando dos ácidos carboxílicos. (Morales, 2020).

Pero si se trata de un alquino terminal, este da como resultado un ácido carboxílico y dióxido de carbono; pero si es un alquino intermedio, nos dará como origen el resultado de un solo ácidos carboxílicos. (Morales, 2020).

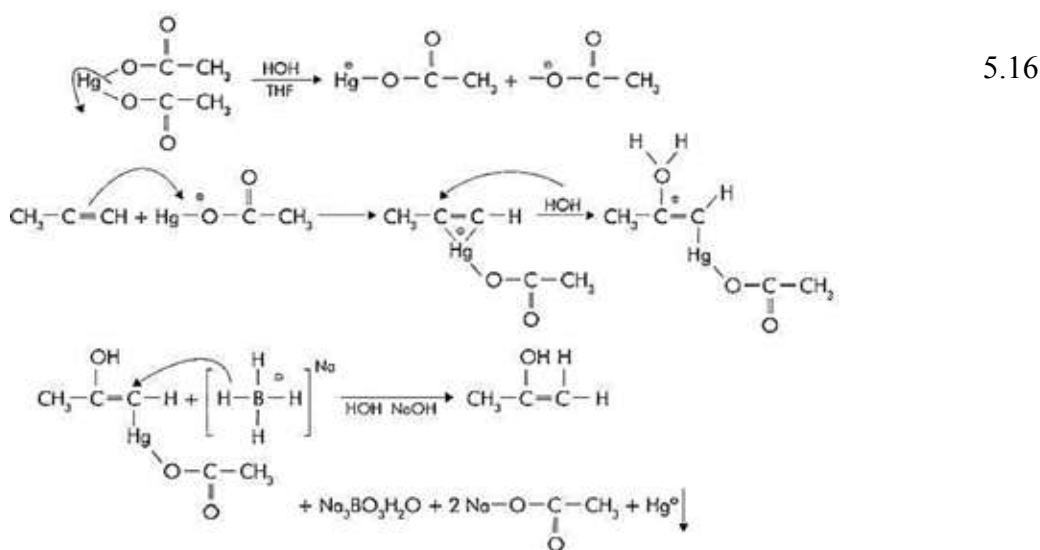


5.2.7.6. Oximercuración desmercuración de los alquinos

Este es otro método utilizado para lograr la hidratación de alquinos dirigida por Markovnikov. En el primer paso, se produce la captación de oxígeno del alquino, que se controla a temperatura ambiente con una solución acuosa de acetato de mercurio ($\text{Hg}(\text{OOCCH}_3)_2$) diluido en tetrahidrofurano (THF) para generar un ion mercurinio; El segundo paso, la desmercuración, generalmente se completa en minutos.

Para realizar y obtener un producto orgánico no aislado, el producto orgánico se reduce in situ con borohidruro de sodio (NaBH_4). De esta forma, la eficiencia de formación de alcohol vinílico es del 90 % o más.

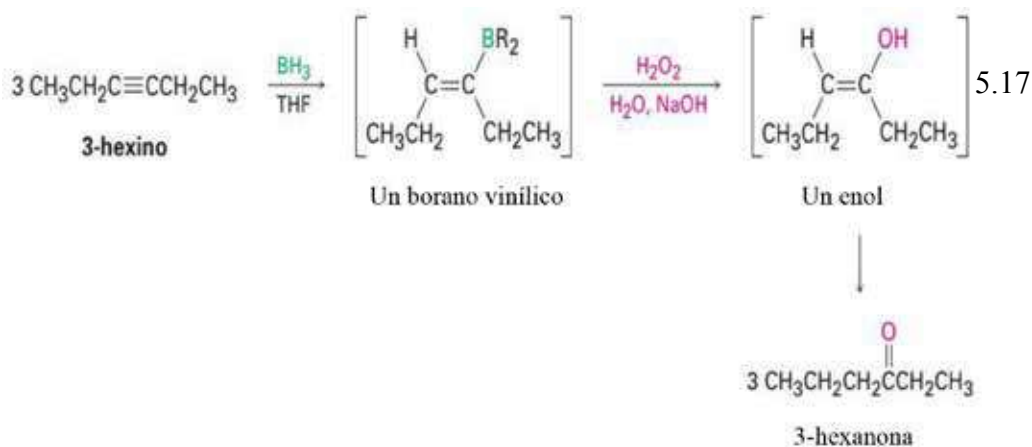
Siempre hay que tener en cuenta que el acetato de mercurio y el borohidruro de sodio son reactivos costosos, sin embargo, este método a menudo tiene ventajas sobre el método de hidratación directa: la reacción es fácil de realizar, la oxidación es práctica y el rendimiento es rápido y bueno. (McMurry, 2014)



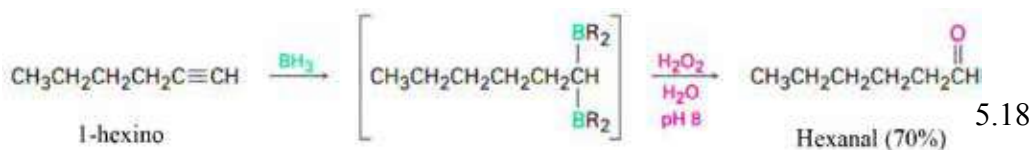
5.2.7.7. Hidroboración oxidación de los alquinos

El borano se agrega de forma breve a un alquino como en un alqueno, y el borano vinílico formado se puede oxidar con H_2O_2 para dar enol. La reacción de isomerización resulta de una cetona o un aldehído, dependiendo de la estructura del reactivo alquino. La oxidación de alquinos endógenos como 3-hexino dan cetonas e hidrogenación/oxidación de alquinos de aldehídos. Tenga en cuenta que el alquino terminal relativamente libre se somete a dos adiciones, lo que produce un intermedio doblemente hidroborado. La oxidación con H_2O_2 a pH 8 reemplaza dos átomos de boro con oxígeno y produce aldehídos.

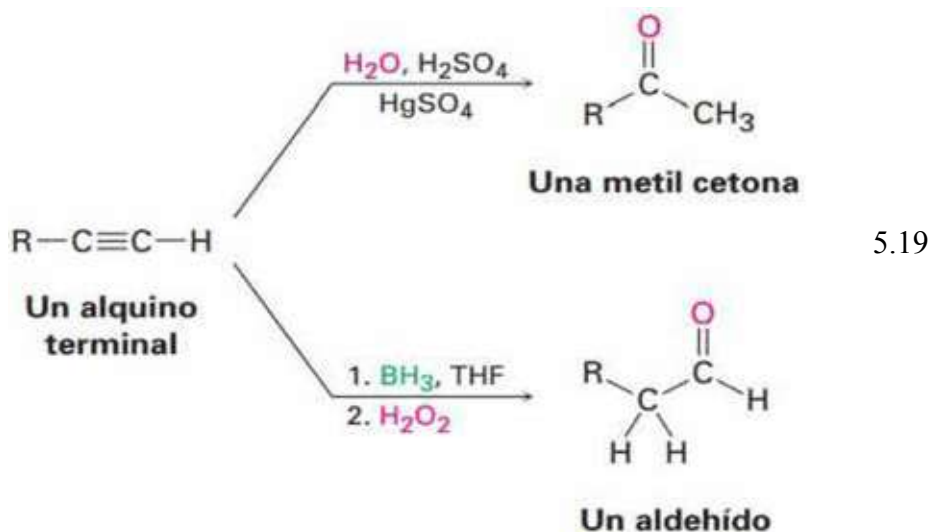
Un alquino interno:



Un alquino terminal:



Secuencia adicional de hidrobtoración/oxidación para la reacción. Mercurio directo (II) - hidratación catalítica de un alqueno terminal debido a los diferentes productos producidos. Hidratación directa ácida Las soluciones acuosas de sulfato de mercurio (II) dan metil cetona, mientras que la hidrobtoración/oxidación del mismo alqueno terminal produce aldehídos. (McMurry, 2014)



5.2.7.8. Ruptura del triple enlace por oxidación

Tanto los alquinos, como los alquenos, se pueden descomponer por reacción es decir romperse. Con agentes oxidantes fuertes como el ozono o KMnO_4 , a pesar de que su reacción es de poco valor y solo lo mencionamos como siempre acompañamiento. El enlace triple generalmente es menos reactivo que el doble enlace y los productos resultantes de la escisión son a veces de bajo rendimiento. Los productos se obtuvieron de derivado de la escisión de un alquino que contiene ácidos carboxílicos; A partir de un alqueno terminal, formando dióxido de carbono como uno de los productos. (McMurry, 2014)

5.3. DIENOS Y POLIENOS

En química orgánica, los dienos y polienos son compuestos que contienen dos o más dobles enlaces carbono-carbono en su estructura molecular.

Un dieno es un compuesto que tiene dos dobles enlaces carbono-carbono. La presencia de estos dobles enlaces confiere a los dienos una mayor reactividad química en comparación con los hidrocarburos saturados, que solo contienen enlaces simples. Los dienos se pueden clasificar en dos categorías principales: dienos conjugados y dienos aislados.

Los dienos conjugados tienen los dobles enlaces adyacentes entre sí y están separados por un solo enlace. Esta configuración de dobles enlaces conjugados les permite tener una mayor estabilidad y reactividad. Ejemplos comunes de dienos conjugados son el 1,3-butadieno y el isopreno.

Por otro lado, los dienos aislados tienen los dobles enlaces separados por más de un enlace carbono-carbono. Estos dienos son menos estables y reactivos en comparación con los dienos conjugados. Un ejemplo de dieno aislado es el 1,4-pentadieno.

Un polieno es un compuesto que contiene más de dos dobles enlaces carbono-carbono en su estructura. Pueden tener una variedad de configuraciones y longitudes de cadena. Los polienos pueden clasificarse en función de la disposición y espaciado de los dobles enlaces. Algunos ejemplos conocidos de polienos son el β -caroteno, un pigmento vegetal, y el ácido linoleico, un ácido graso esencial.

Los dienos y polienos son de interés en química orgánica debido a su capacidad para participar en reacciones de adición, cicloadición y polimerización, entre otras. Además, los polienos conjugados, en particular, exhiben propiedades electrónicas especiales, como absorción de luz en el rango visible y capacidad de transporte de carga, lo que los hace útiles en aplicaciones como la síntesis de colorantes y materiales semiconductores.

5.3.1. Aplicaciones

El acetileno es una sustancia para la composición a gran escala que sirve para compuestos orgánicos importantes entre ellos el ácido acético y algunas sustancias insaturadas susceptibles de polimerización dando plásticos y caucho. Otros alquinos también forman valiosos intermedios de síntesis a nivel de laboratorio. (Allinger et. al. 1991)

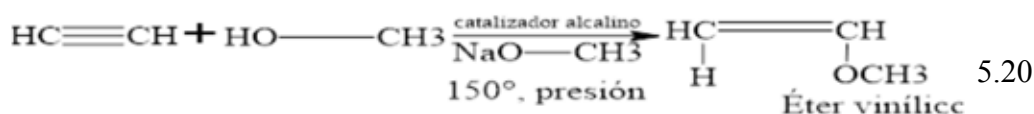
El alquino más comercial en la industrial es el acetileno y además que es el más importante; su principal uso es como combustible de sopletes de acetileno/oxígeno. El acetileno es un gas incoloro con un olor muy desagradable, el cual arde en presencia de aire con una llama de color amarilla negruzca. Sin embargo, cuando la llama es alimentada con oxígeno puro, el color cambia a azul claro, y su temperatura aumenta de manera radical. La llama del soplete de acetileno/oxígeno alcanza temperaturas tan elevadas como 2 800 °C (Leroy, 2011).

Walter Reppe, quien trabajó en Alemania a principios de 1940 en las aplicaciones del acetileno, dio origen a diversas técnicas para el manejo del acetileno a presión en lo que corresponde a condiciones de seguridad. Reppe y sus colaboradores hicieron experimentos con una serie de síntesis que hoy en día son de importancia comercial. (Sierra, 2009).

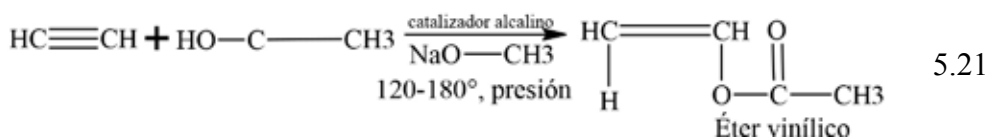
Las reacciones que se desarrollaron se pueden clasificar en tres grupos: (Sierra, 2009).

5.3.2. Vinilación

La adición de alcoholes o ácidos al acetileno, en presencia de un catalizador básico, da el principio a la formación de éteres y ésteres vinílicos. Los alquinos también realizan reacciones de adición nucleofílica. Para la reacción del alquino además se requiere de un catalizador básico, presión y temperatura elevadas. (Sierra, 2009).



A diferencia del alcohol vinílico, que se obtiene realizada la adición de agua a los alquinos, el éter vinílico puede ser considerado uno de los derivados de estos compuestos, los cuales pueden ser considerados como muy estables. Los éteres y ésteres vinílicos se pueden polimerizar para dar poliviniléteres o polivinilésteres; también se pueden copolimerizar con cloruro de vinilo o cloruro de vinilideno, con lo cual se obtienen muchos de los polímeros más conocidos. (Sierra, 2009)

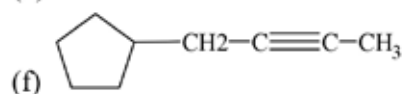
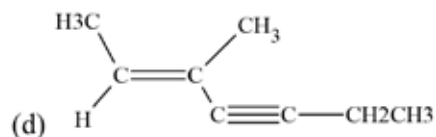
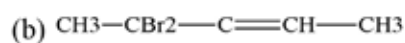
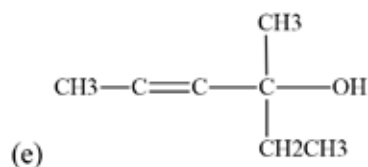
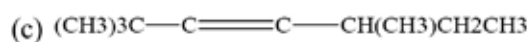
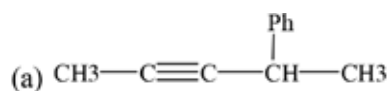


Otro compuesto que es usado en los sopletes y que además arde mucho mejor en el aire y no se descompone tan fácilmente como el acetileno es el metilacetileno; el cual es usado en soldaduras a nivel doméstico como soldaduras donde se requiere temperaturas mucho más altas que un soplete de propano. Existe un gas que se vende de manera comercial, y es conocido como el gas MAPP®, es decir el gas MetilAcetilenProPadieno; el cual se lo obtiene a partir de la síntesis del metilacetileno el cual genera una amalgama con el isómero aleño conocido como el isómero propadieno (Wade, 2011).

5.4. EJERCICIOS PROPUESTOS

1. Muestre cómo llevaría a cabo las siguientes transformaciones sintéticas. Muestre todos los intermediarios.
 - a) 2,2-dibromobutano $\rightarrow$ but-1-ino
 - b) 2,2-dibromobutano $\rightarrow$ but-2-ino
 - c) but-1-ino $\rightarrow$ oct-3-ino
 - d) trans-hex-2-eno $\rightarrow$ hex-2-ino
 - e) 2,2-dibromohexano $\rightarrow$ hex-1-ino
 - f) ciclodecino $\rightarrow$ cis-ciclodeceno
 - g) ciclodecino $\rightarrow$ trans-ciclodeceno
 - h) hex-1-ino $\rightarrow$ hexan-2-ona, $\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
 - i) hex-1-ino $\rightarrow$ hexanal, $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CHO}$
 - j) trans-hex-2-eno $\rightarrow$ cis-hex-2-eno
2. Utilizando cualquiera de los reactivos inorgánicos necesarios, muestre cómo convertiría acetileno y bromuro de isobutilo en:
 - (a) meso-2,7-dimetiloctano-4,5-diol, $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}(\text{OH})\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$
3. Dibuje y dé nombre a los tres alquinos de fórmula C_5H_8 . ¿Cuáles compuestos del inciso (a) reaccionan con el amiduro de sodio? Muestre los productos resultantes

4. Escriba los nombres IUPAC de los siguientes compuestos

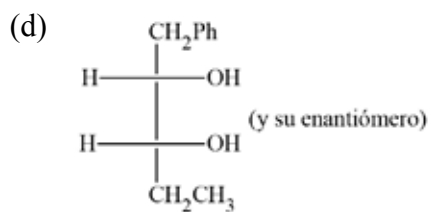


5. Muestre cómo sintetizaría los siguientes compuestos a partir de acetileno y cualesquier otros reactivos necesarios:

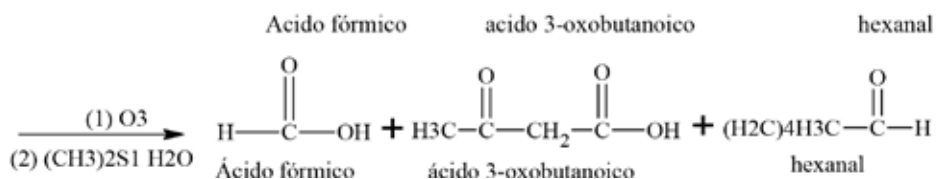
(a) 6-fenilhex-1-en-4-ino

(b) cis-1-fenilpent-2-eno

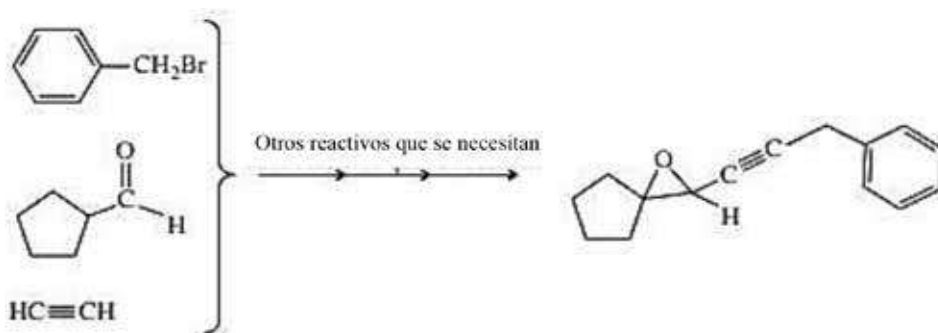
(c) trans-1-fenilpent-2-eno



6. Cuando el compuesto (Z) se trata con ozono, seguido de sulfuro de dimetilo y luego se lava con agua, los productos son ácido fórmico, ácido 3-oxobutanoico y hexanal.



7. Muestre cómo convertiría las siguientes materias primas en el compuesto objetivo. Puede utilizar cualquier reactivo adicional que necesite



GLOSARIO DE TÉRMINOS

- **Ácido carboxílico:** un compuesto orgánico que contiene un grupo carboxilo ($-\text{COOH}$), que es responsable de su acidez.
- **Alcano:** un hidrocarburo saturado que consiste en una cadena de carbono sin enlaces dobles o triples.
- **Aldehído:** un compuesto orgánico que contiene un grupo funcional $-\text{CHO}$, que está unido a un átomo de carbono.
- **Alqueno:** un hidrocarburo insaturado que contiene al menos un enlace doble de carbono.
- **Alquino:** un hidrocarburo insaturado que contiene al menos un enlace triple de carbono.
- **Aromático:** un compuesto orgánico que contiene un sistema cíclico de enlaces π conjugados, como el benceno.
- **Enlace covalente:** enlace químico en el que dos átomos comparten electrones.
- **Hidrocarburo:** compuesto orgánico que tiene únicamente átomos de carbono e hidrógeno.
- **Isómero:** dos o más compuestos que tienen la misma fórmula molecular pero diferente estructura.
- **Radical libre:** átomo o grupo de átomos con un electrón desapareado, lo que los hace altamente reactivos.
- **Resonancia:** la distribución electrónica en una molécula que no se puede describir con una única estructura de Lewis y se representa mediante formas resonantes.
- **Estereoisómeros:** isómeros que tienen la misma fórmula molecular y la misma conectividad de átomos, pero difieren en la disposición espacial de sus átomos.

- **Sustituyente:** un átomo o grupo de átomos que ocupa un lugar específico en una molécula orgánica.
- **Tautomería:** un fenómeno en el que una molécula existe en formas estructurales diferentes, llamadas tautómeros, que están en equilibrio químico.

BIBLIOGRAFÍA

- Allinger, N., Cava, M., De Jongh, D., Johnson, C., Lebel, N., & Stevens, C. (1991). *Química orgánica* (3.^a ed.). Barcelona: Editorial Reverté, S. A.
- Autino, J. C., Romanelli, G., & Ruiz, D. M. (2013). *Introducción a la química orgánica*. La Plata: Editorial de la Universidad de La Plata. Obtenido de <http://sedici.unlp.edu.ar/handle/10915/31664>
- Brito Arias, M. A. (2008). *Introducción a la química orgánica y síntesis de fármacos*. México: Instituto Politécnico Nacional. Obtenido de <https://elibro.net/es/lc/epoch/titulos/101715>
- Cabildo Miranda, M., García Fraile, A., López García, C., & Santa María Gutiérrez, M. D. (2008). *Química orgánica*. UNED - Universidad Nacional de Educación a Distancia. Obtenido de <https://elibro.net/es/ereader/epoch/48371?page=298>
- Cabildo Miranda, M. d., García Fraile, A., López García, C. y Santa María Gutiérrez, M. D. (2008). *Química orgánica*. UNED - Universidad Nacional de Educación a Distancia.
- Cabildo, M., y Pilar, M. d. (2008). *Química orgánica*. UNED - Universidad Nacional de Educación a Distancia. Obtenido de Elibro: <https://elibro.net/es/ereader/epoch/48371>
- Equipo Editorial Lifeder. (7 de Enero de 2022). *Lifeder*. Obtenido de Lifeder: <https://www.lifeder.com/alquinos/>
- Fernández, G. (2009). *Química Orgánica*. Obtenido de <https://books.google.es/books?hl=es&id=uHXGAQAQBAJ>
- Fernández, G. (25 de 03 de 2009). *Química Orgánica* Universidad de Chemia. Obtenido de Química Orgánica Universidad de Chemia: <https://www.quimicaorganica.org/alquinos/366-propiedades-fisicas-de-alquinos.html>

- Fernández, G. (15 de Mayo de 2011). *Química Orgánica*. Obtenido de <https://www.quimicaorganica.net/content/reacci%C3%B3n-de-alquinos-con-agua#:~:text=Adici%C3%B3n%20de%20agua%20a%20un,tautomeriza%20a%20un%20compuesto%20carbon%C3%ADlico>.
- Fracaroli, L. A. (31 de Agosto de 2009). *Carbénos libres y complejos carbenos*. Capítulo 1 - RDU - UNC.
- Gómez Sierra, C. (2009). *Introducción a la química orgánica*. Instituto Politécnico Nacional. Obtenido de <https://elibro.net/es/ereader/epoch/101711>
- Gómez Sierra, C. G., Clicerio Domínguez Sánchez, F., y Márquez Nuño, R. (2009). *Introducción a la química orgánica*. Mexico: Instituto Politécnico Nacional.
- Hernández Gaspar, C. (2018). *Determinación y cuantificación de alcanos en muestras arqueológicas de Cueva Pintada de Gáldar*. Obtenido de <https://riullull.es/xmlui/bitstream/handle/915/10633/Determinacion%20y%20cuantificacion%20de%20alcanos%20en%20muestras%20arqueologicas%20de%20Cueva%20Pintada%20de%20Galdar.pdf?sequence=1&isAllowed=y>
- Hernández, H. Z. (25 de Septiembre de 2017). *Química Orgánica*. Hidalgo, México.
- Leroy, W. (2011). *Química orgánica*. Volumen 1. México: Pearson Educación.
- Martínez Márquez, E. (2012). *Química II*. México: Cengage Learning.
- McMurry, J. (2012). *Química orgánica* (8a. ed.). Cengage Learning.
- McMurry, J. (2008). Alquinos: introducción a la síntesis orgánica. En J. McMurry, *Química orgánica* (7a. edición., págs. 268-270). Cengage Learning.
- McMurry, J. (2019). Alquinos: introducción a la síntesis orgánica. En J. McMurry, *Química orgánica*, 7a. edición (pág. 270). Cengage Learning.
- Morales, S. G. (2020). *StuDocu*. Obtenido de <https://www.studocu.com/es-ar/document/universidad-de-las-fuerzas-armadas-de-ecuador/quimica-del-carbono/mecanismo-de-reaccion-ozonolisis/9083064>
- Paredes, R., Yates, B., Zuluaga, H. F., & Insuasty, B. (2011). *Introducción a la química orgánica: Tomo I*. Santiago de Cali: Programa Editorial Universidad del Valle.

- Paredes, R., Yates, B., y Zuluaga, H. (2011). *Introducción a la química orgánica: Tomo I* [Fotografía]. Programa Editorial Universidad del Valle. Obtenido de <https://elibro.net/es/ereader/epoch/129510>
- Paredes, R., Yates, B., y Zuluaga, H. F. (2009). *Introducción a la química orgánica: Tomo I*. Colombia: Programa Editorial Universidad del Valle.
- Paredes, R., Yates, B., Zuluaga, H. F., y Insuasty, B. (2011). *Introducción a la química orgánica: Tomo I*. Santiago de Cali: Programa Editorial Universidad del Valle.
- Química Orgánica*. 2019. Obtenido de <https://www3.uji.es/~mcarda/DOCENCIA/tema7QO.pdf>
- Ramírez Regalado, V. M. (2016). *Química 2: cálculos en las reacciones y química del carbono*. México: Grupo Editorial Patria. Obtenido de <https://elibro.net/es/ereader/epoch/40441?page=150>
- Rivera Álvarez, G. (2010). *Química II*. México: Cengage Learning. Rivera, W. (2008). Síntesis de alcanos [Fotografías]. Obtenido de Scribd: <https://es.scribd.com/document/261089184/Sintesis-y-Reactividad-de-Alcanos-Alquenos-y-Alquinos-2>
- Rodríguez, T. (17 de Septiembre de 2019). *Infografías: wordpress*. Obtenido de Wordpress: <https://infografiasquimicaorganica.wordpress.com/2019/09/17/carbenos-estructura-y-formacion/>
- Sierra, G. (2009). *Introducción a la química orgánica*. México: Instituto Politécnico Nacional.
- Sierra, R. (24 de Febrero de 2019). *Documentos: SCRIBD*. Obtenido de SCRIBD: <https://es.scribd.com/document/400382755/Tema-4-Carbenos-y-Radicales-1>
- SistemadeEstudiosMed. (2 de Enero de 2022). *Unidad V. Alquenos* slideshare. Obtenido de slideshare: <https://es.slideshare.net/SistemadeEstudiosMed/unidad-v-alquenos>
- Universidad Nacional De Tres De Febrero. (2009). *Estructura y preparación de alquenos*. TECNICATURA EN EDICIÓN. Obtenido de: http://materiales.untrefvirtual.edu.ar/documentos_extras/20384_quimica_ii/Estructura_y_preparacion_de_alquenos.pdf

- Vidaurri, O. (2018). *Apuntes de Química Orgánica*. Obtenido de Uanl.mx: <http://cdigital.dgb.uanl.mx/la/1020082339/1020082339.PDF>
- Wade, L. (2011). *Química orgánica* (7a. edición) . *Química orgánica*. . Obtenido de file:///C:/Users/USER/Downloads/Qu%C3%ADmica%20Org%C3%A1nica%20Wade%207a%20Edici%C3%B3n-Vol1.pdf
- Weininger, S. J. (2008). Química Orgánica. En S. J. Weininger, *Química Orgánica* (pág. 1115). Barcelona: Reverte .

El presente libro de química orgánica es el producto de más de 30 años de experiencia en el mundo de la academia y en el dictado de la cátedra; es así que al adentrarnos en su desarrollo entendemos que el entorno en que vivimos es una compleja organización de diferentes sustancias sujetas a continuas transformaciones gracias a los principios fundamentales de la química que ha logrado sintetizar y caracterizar una gran cantidad de productos para satisfacer las necesidades en el campo industrial, tecnológico, de la alimentación, salud, vestido, etc.; razón suficiente para abordar y describir detalladamente las propiedades de los compuestos orgánicos con sus fórmulas estructurales y moleculares, enfatizando la importancia del átomo de carbono, sus enlaces, resonancia, hibridación y tetravalencia, resaltando de forma explícita las Funciones Químicas Orgánicas con sus respectivos grupos funcionales poniendo especial interés en la nomenclatura química orgánica; así como también se destaca el estudio de los hidrocarburos saturados: parafinas e hidrocarburos insaturados: olefinas y acetilenos; mencionando fundamentalmente los métodos de obtención, los mecanismos de reacción y sus aplicaciones; combinando con una serie de ejercicios propuestos; de esta manera se pretende que esta obra se convierta en un material de consulta para los estudiantes.

Georgina Ipatia Moreno Andrade. Doctora en Química, especialidad Orgánico-Bioquímica, graduada en la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, máster en Protección Ambiental y magíster en Educación a Distancia, con un Diplomado en las Nuevas Tecnologías de la Información y la Comunicación. Docente Investigadora de la ESPOCH desde el año 1997, profesora de Química Orgánica, Química General, Química II y de Sostenibilidad Ambiental, en las carreras de Ingeniería en Agroindustria, Zootecnia y Medicina Veterinaria de la Facultad de Ciencias Pecuarias. Autora de varias publicaciones en revistas indexadas.

ISBN: 978-9942-48-585-4

