

TEMA 4.

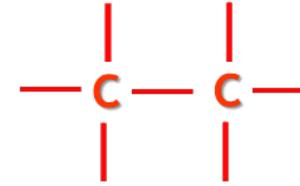
ALCANOS Y CICLOALCANOS

Dra. Aida Flores

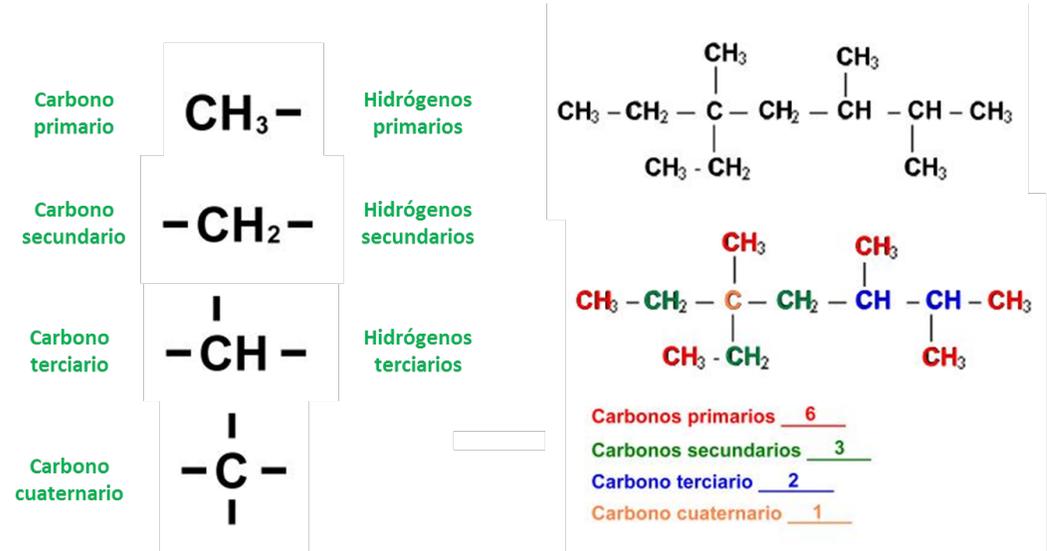
Dra. Viviana Negri

1. INTRODUCCIÓN

Sinónimos: hidrocarburos saturados, hidrocarburos alifáticos o parafinas



- Fórmula general: C_nH_{2n+2} , donde $n = 1, 2, \dots$
- Compuestos orgánicos más sencillos (no tienen grupos funcionales): sólo contienen C e H.
- Enlaces sencillos σ covalentes: C-C y C-H.
- Cada C forma un total de 4 enlaces sencillos: hibridación sp^3 .
- Alcano más sencillo: CH_4



ESTRUCTURA:

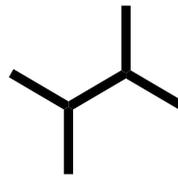
Lineales

Los hidrocarburos más simples se encuentran en forma lineal



Ramificados

Los hidrocarburos más comunes son ramificados. Son isómeros estructurales de los lineales



Cíclicos

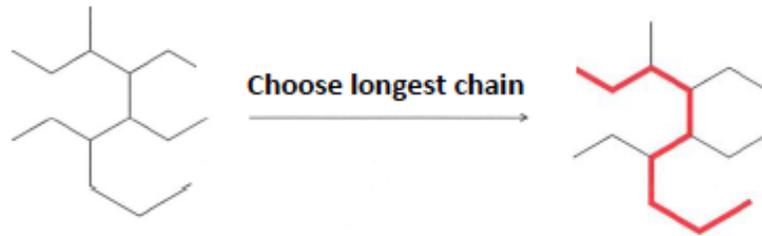
Son hidrocarburos de estructura cerrada



2. NOMENCLATURA

Las reglas de la IUPAC permiten obtener los nombres sistemáticos de los compuestos orgánicos.

1. **Identifica la cadena carbonada más larga.** Será la **cadena principal** y dará nombre al compuesto.

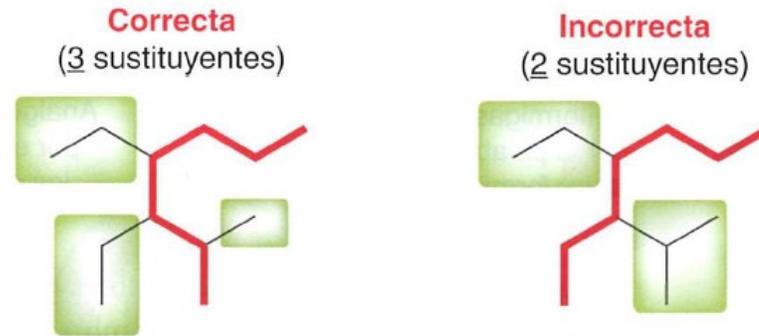


PARENT NAMES FOR ALKANES					
NUMBER OF CARBON ATOMS	PARENT	NAME OF ALKANE	NUMBER OF CARBON ATOMS	PARENT	NAME OF ALKANE
1	meth	methane	11	undec	undecane
2	eth	ethane	12	dodec	dodecane
3	prop	propane	13	tridec	tridecane
4	but	butane	14	tetradec	tetradecane
5	pent	pentane	15	pentadec	pentadecane
6	hex	hexane	20	eicos	eicosane
7	hept	heptane	30	triacont	triacontane
8	oct	octane	40	tetracont	tetracontane
9	non	nonane	50	pentacont	pentacontane
10	dec	decane	100	hect	hectane

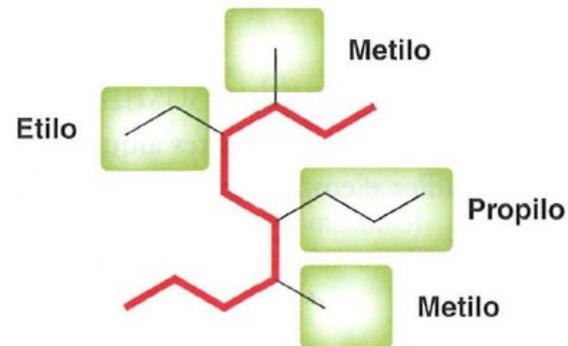
Se añade el sufijo -ano.

2. Identifica los sustituyentes. Los sustituyentes o radicales son grupos unidos a la cadena principal.

Si en una estructura hay dos que tengan la misma longitud, se elige la que contenga un mayor número de sustituyentes.

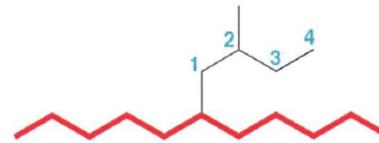


3. Nombra los sustituyentes. Cuando un alcano es un sustituyente se nombra *alquilo*. Por tanto, la terminación -ano se sustituye por -ilo.



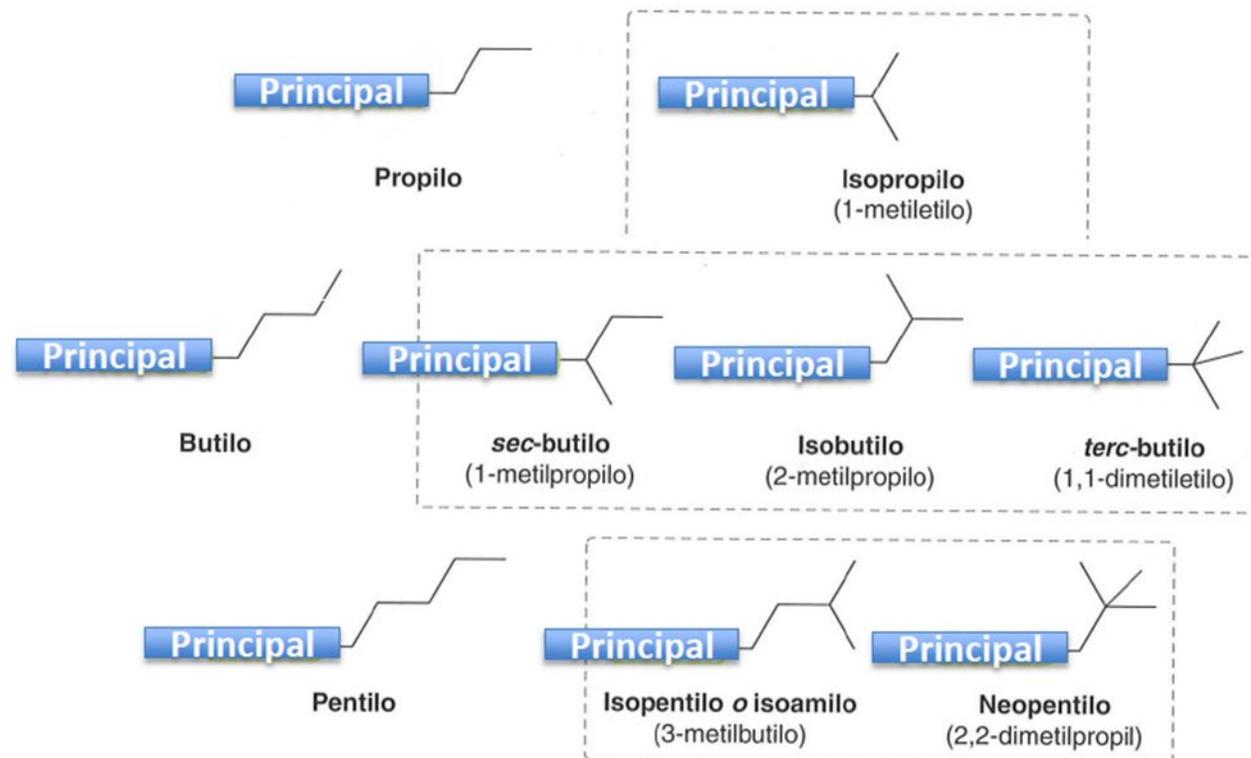
SUSTITUYENTES
COMPLEJOS:

Se colocan números en el sustituyente desde la cadena principal hacia afuera, eligiendo la cadena más larga, y sobre ella se nombran sus sustituyentes.



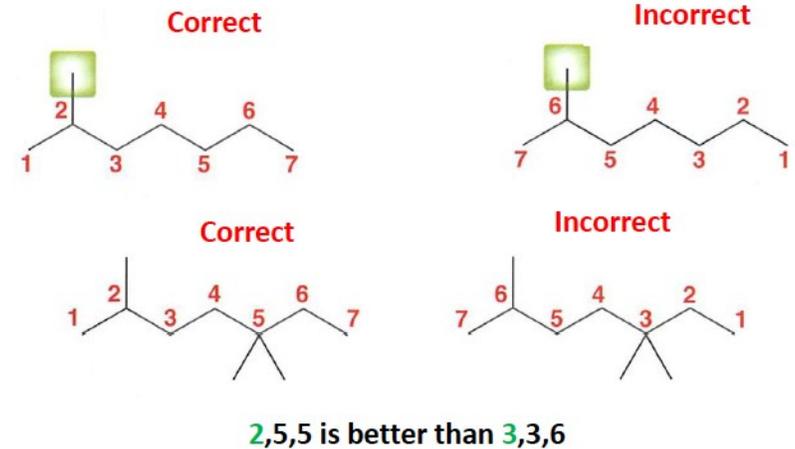
Es un grupo 2-metilbutilo

SUSTITUYENTES COMUNES
QUE NO USAN NOMBRE
SISTEMÁTICO:



4. Numera la cadena principal.

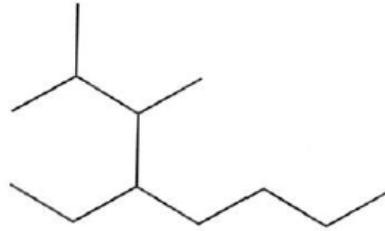
- ✓ El número se denomina localizador.
- ✓ Si sólo hay un sustituyente, se le da el localizador más bajo posible.
- ✓ Si hay varios sustituyentes, se enumeran de manera que el primero que aparezca tenga el localizador más bajo.
- ✓ Si se obtienen los mismos localizadores numerando en ambas direcciones, se asignará el localizador más bajo al primer sustituyente por orden alfabético.



5. Nombra el compuesto:

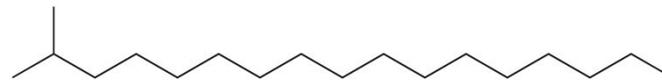
- ✓ Los sustituyentes se nombran por orden alfabético.
- ✓ Si el **mismo sustituyente** aparece más de una vez, se indica el número de veces mediante un **prefijo** (di, tri, tetra, etc.).
- ✓ En los prefijos no se considera el orden alfabético, excepto el prefijo *iso* (isobutil o isopropil)
- ✓ Finalmente se escribe el nombre del alcano, poniendo primero la lista de sustituyentes en orden alfabético con su localizador cada uno y al final el nombre de la cadena principal.
- ✓ Los números se separan por comas, y las palabras y números con barras.

EJEMPLO: Nombra el siguiente compuesto:

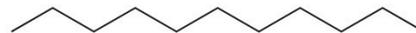


3. FUENTES DE OBTENCIÓN Y USOS

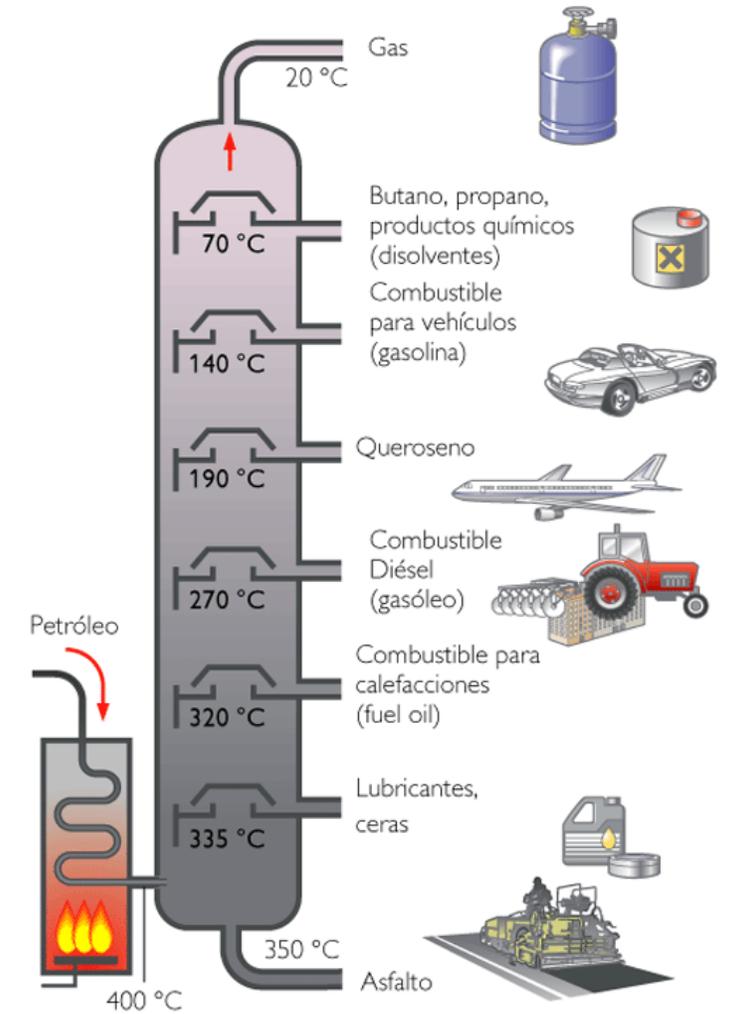
- Forman parte de la **atmósfera** de algunos planetas (metano y etano). El metano es un gas de efecto invernadero.
- Biogas**: el metano que procede de la digestión de herbívoros y procesos de descomposición de materia orgánica. <http://www.youtube.com/watch?v=Vfpru30YOPM>
- Petróleo**: mezcla de alcanos, hidrocarburos aromáticos, y compuestos con nitrógeno y azufre. Es la principal fuente. Sus componentes se separan por **destilación fraccionada en las refinerías**, aprovechando los distintos puntos de ebullición.
- Seres vivos**: algunas feromonas, aceites, ceras, etc.



2-metilheptadecano
Feromona sexual de la mariposa tigre femenina



Undecano
Feromona de agregación de la cucaracha *Blaberus cranifer*



Los alcanos se utilizan principalmente como combustibles, disolventes, lubricantes, y forman polímeros (polietileno, polipropileno).



Gas natural

(mezcla de metano, etano, propano y butano)



Polietileno

(polímero lineal con 100.000 unidades CH_2)

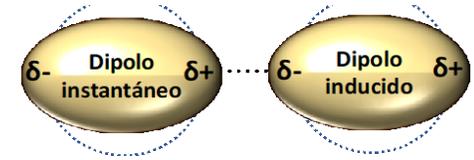


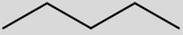
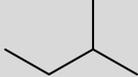
Parafina

($\text{C}_{20}\text{-C}_{40}$)

4. PROPIEDADES FÍSICAS

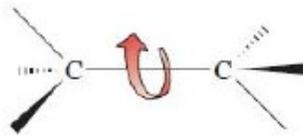
Son moléculas **apolares**, unidas **por fuerzas de London** (dipolo inducido-dipolo inducido).



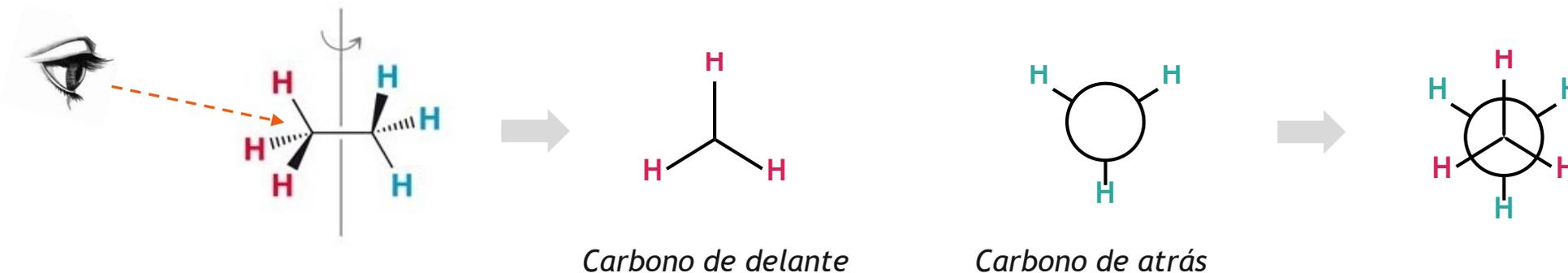
ESTADO FÍSICO	Hasta el butano son gases, hasta aproximadamente C17 son líquidos y después sólidos
SOLUBILIDAD	Insolubles en agua. Sólo se disuelven en disolventes orgánicos apolares
PUNTOS FUSIÓN Y EBULLICIÓN	<ul style="list-style-type: none"> • Aumenta con el peso molecular, al existir más fuerzas de London • La ramificación dificulta el empaquetamiento: aleja las moléculas, disminuye las fuerzas de London y baja el <u>punto de fusión</u> <div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center; margin-top: 20px;"> <div style="text-align: center;">  <p>p.e.= -1 °</p> </div> <div style="text-align: center;">  <p>p.e.= 36 °</p> </div> <div style="text-align: center;">  <p>p.e.= 28 °</p> </div> </div>

5. ANÁLISIS CONFORMACIONAL

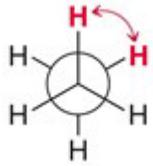
Los alcanos son moléculas flexibles. Los enlaces σ permiten, en principio, giro libre. Las moléculas están en continuo movimiento. Bajando mucho la temperatura se podrían “congelar” distintas posiciones o **CONFORMACIONES**.



Para estudiar la estabilidad de las diferentes conformaciones empleamos principalmente la **proyección de Newman**: mira la molécula a lo largo del enlace C-C que gira. El carbono de delante se representa con un punto y el de atrás con un círculo.



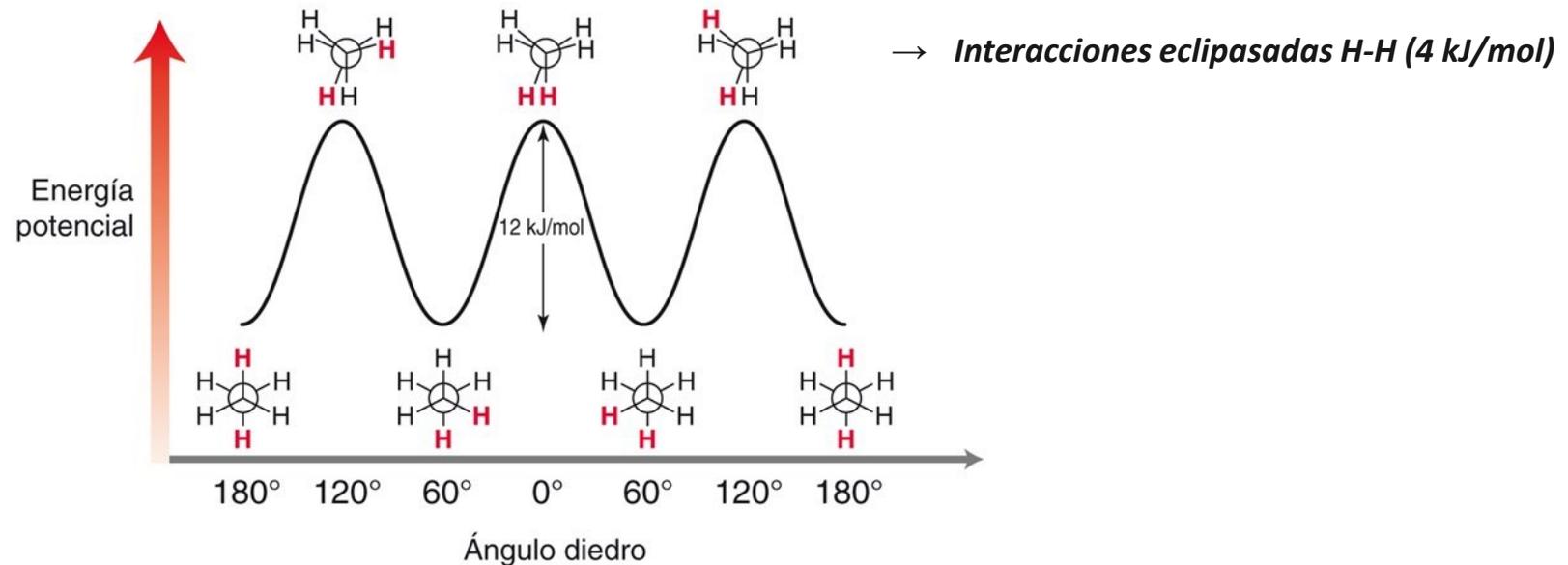
ETANO:



Ángulo diedro
 60°



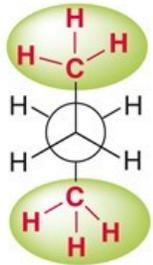
- Los conformémeros se obtienen por rotación (60°) del enlace sencillo C-C: se mantiene estacionario el átomo de C de atrás mientras que el C de delante va girando en sentido de las agujas del reloj.
- La energía empleada para pasar de un conformémero a otro se denomina **Energía Potencial**.
- Hay dos conformaciones principales: **eclipsadas** ($\theta = 0^\circ$) menos estables (mayor EP), y **alternadas** ($\theta = 60^\circ$), más estables (menor EP).
- Las conformaciones eclipsadas se consideran estados de transición entre una conformación alterna y otra.



BUTANO:

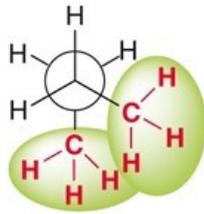
El diagrama de energía muestra que no todas las conformaciones eclipsadas son degeneradas, ni tampoco las alternadas.

CONFORMACIONES ALTERNADAS:



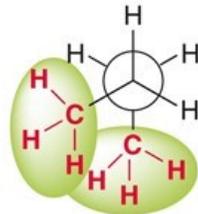
Anti

Los grupos metilo están alejados



Gauche

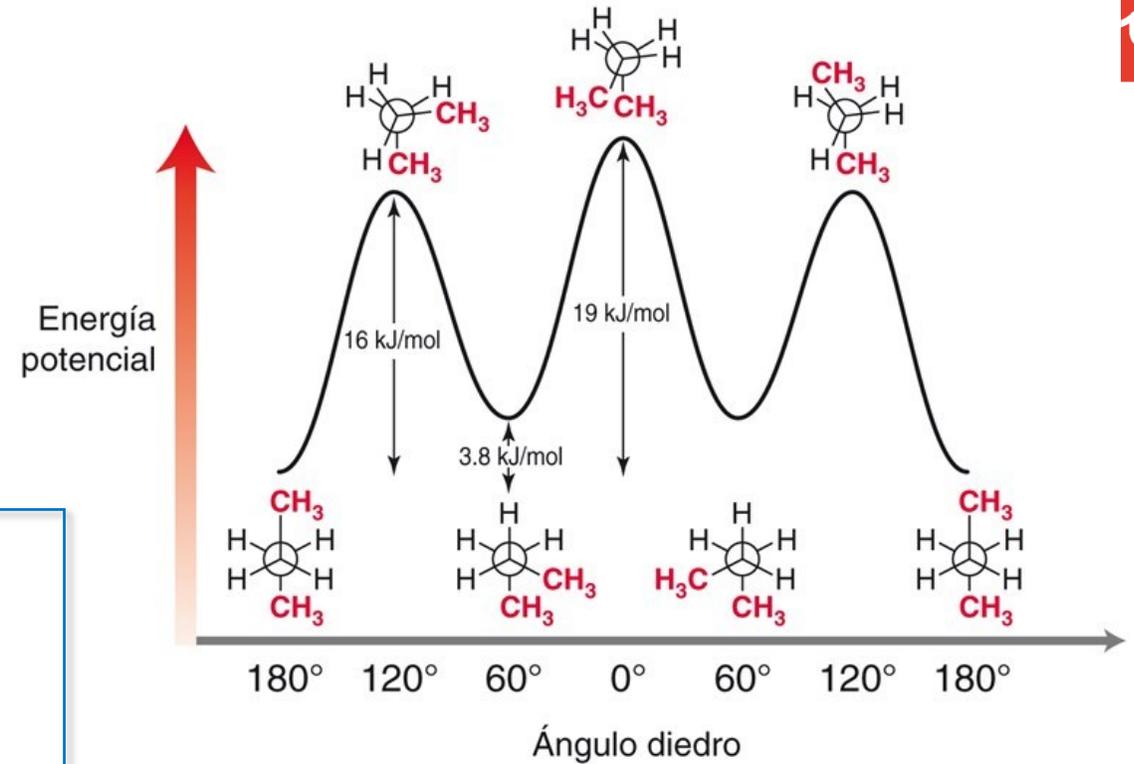
Los grupos metilo experimentan interacción por cercanía



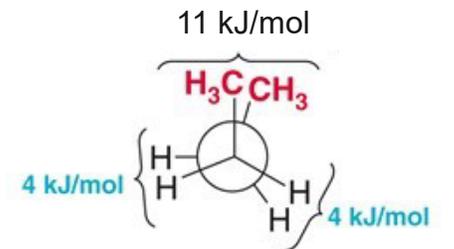
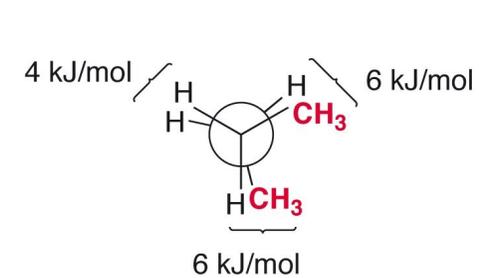
Gauche

Los grupos metilo experimentan interacción por cercanía

Interacción gauche = impedimento estérico (3,8 kJ/mol)



CONFORMACIONES ECLIPSADAS:



Costo total = 16 kJ/mol

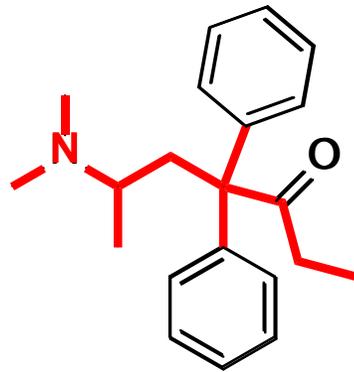
Costo total = 19 kJ/mol



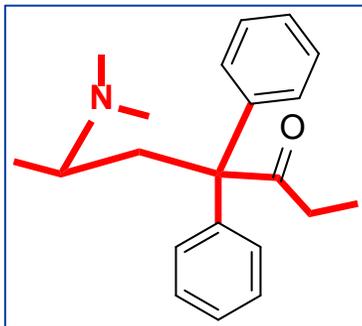
EJEMPLO: Analice la conformación más estable del (2R, 3R)-dibromobutano.

IMPORTANCIA BIOLÓGICA DE CONFÓRMEROS:

Los receptores biológicos reconocen estructuras tridimensionales específicas, es decir, un ordenamiento específico de los grupos funcionales.

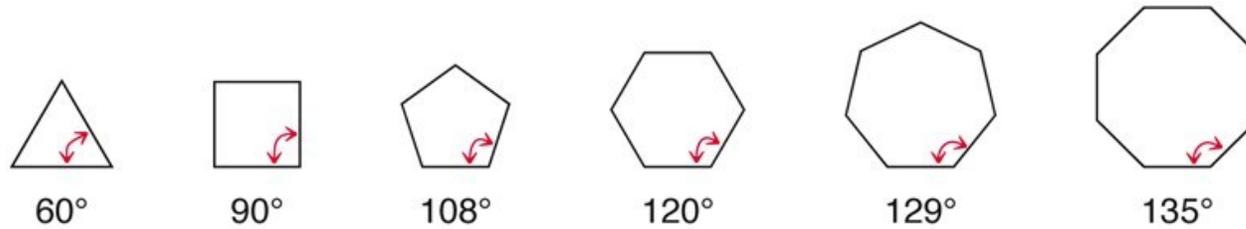


Metadona: tiene muchos enlaces simples que pueden rotar y dan flexibilidad a la molécula. Sólo uno de los conformeros que puede formar se une al receptor.



Las otras conformaciones más abiertas de la metadona, probablemente son incapaces de unirse al receptor.

6. CICLOALCANOS

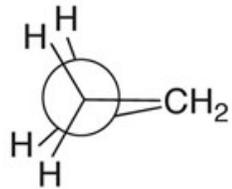


!Los cicloalcanos no son planos!

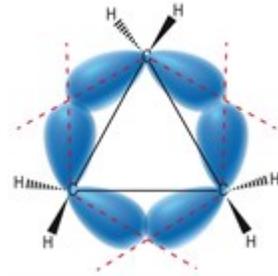
- ✓ Un enlace sencillo C-C tiene una hibridación sp^3 y un ángulo de 109° .
- ✓ Los cicloalcanos intentan adoptar este valor con movimientos conformacionales.
- ✓ **Tensión angular**: aumento de energía asociado a la desviación del ángulo preferido $109,5^\circ$

CICLOPROPANO

Muy inestable por su elevada tensión angular y torsional.
Son estructuras planas



Tensión torsional



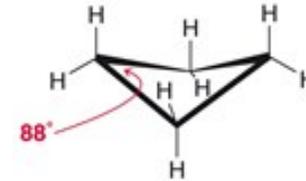
Tensión angular (60 °)

CICLOBUTANO

Menor tensión angular pero mayor tensión torsional que el ciclopropano. Se alivia la tensión torsional adoptando conformación doblada.



90 °



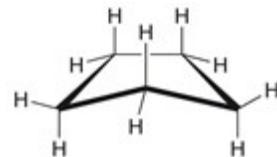
88°

CICLOPENTANO

Poca tensión angular. La tensión torsional se reduce adoptando la conformación de *sobre*

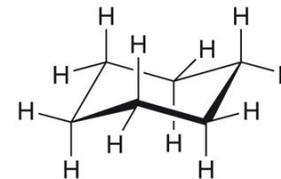


108 °

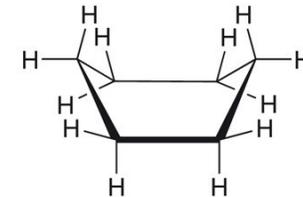


CICLOHEXANO

Anillo más estable. La conformación de *silla* no tiene tensión angular ni torsional. La conformación de *bote* tiene tensión torsional.



Silla

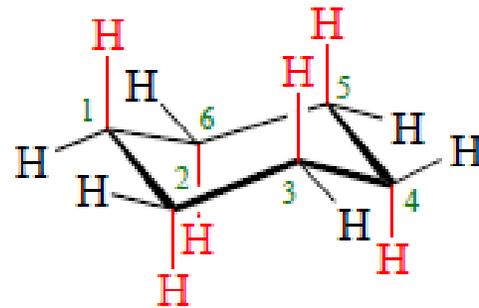


Bote

CONFORMACIÓN DE SILLA DEL CICLOHEXANO:

Cada átomo de carbono tiene dos sustituyentes localizados en posiciones diferenciadas:

- *Posición axial*: paralela al eje vertical
- *Posición ecuatorial*: se orienta aproximadamente en el ecuador del anillo



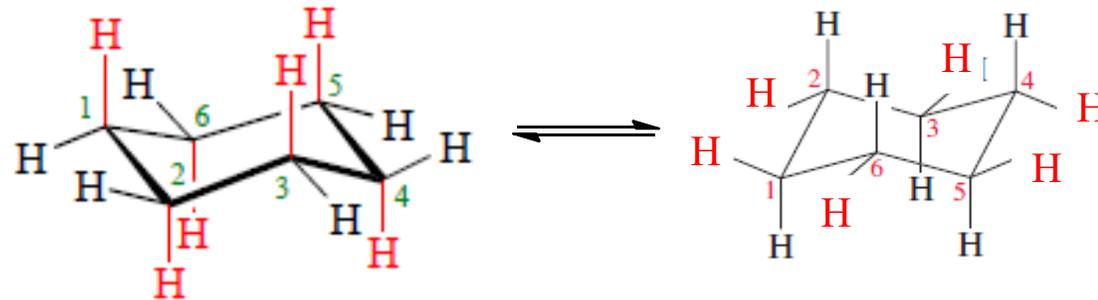
H axiales

H ecuatoriales

PASOS PARA DIBUJAR UNA CONFORMACIÓN DE SILLA

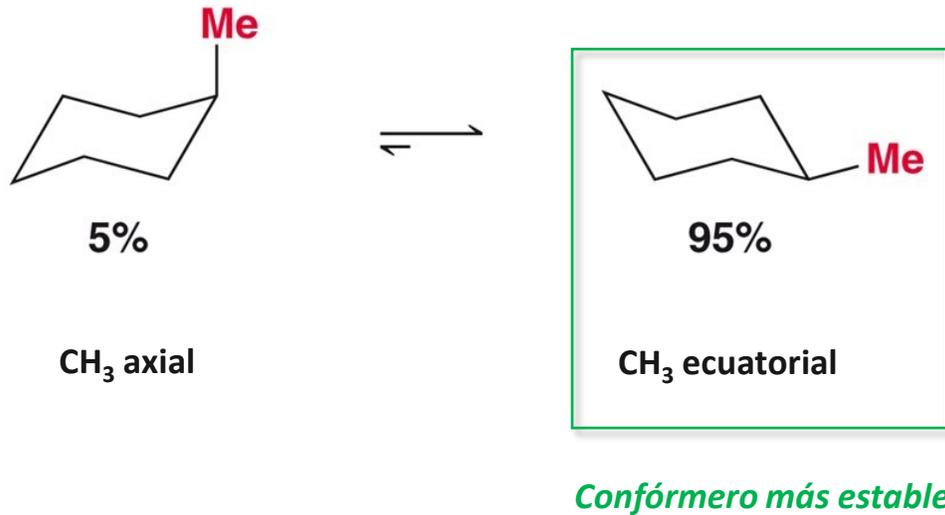
- Paso 1**  Dibuje una V **amplia**.
- Paso 2**  Dibuje una línea que baje en un ángulo de 60° y que termine justo antes del centro de la V.
- Paso 3**  Dibuje una línea paralela al lado izquierdo de la V que termine justo antes que el lado izquierdo de la V.
- Paso 4**  Dibuje una línea paralela a la línea del Paso 2, llegando a la misma altura que en ésta.
- Paso 5**  Conecte los extremos.

El ciclohexano está “vibrando” entre dos sillas. Es decir, existen dos conformeros de ciclohexano que están en equilibrio y continuo movimiento. Si un sustituyente se encuentra en posición axial en un conformero, pasará a localizarse en posición ecuatorial en el otro, y viceversa.

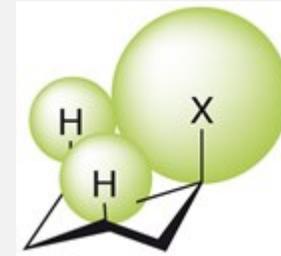


En el ciclohexano sin sustituyentes, ambos conformeros son igual de estables.

ESTABILIDAD DE AMBOS CONFÓRMEROS DE SILLA:



La nube de electrones del sustituyente ocupa la misma región del espacio que los H en posición axial, produciendo un gran impedimento estérico → *interacción 1,3-diaxial*



El equilibrio queda desplazado hacia el confórmero que tiene el sustituyente en posición ecuatorial evitando las interacciones 1,3-diaxiales

ESTEREOISOMERÍA CIS-TRANS:

Cuando existen dos o más sustituyentes, existe la isomeria cis/trans.

ISÓMERO CIS:

Sustituyentes orientados hacia el mismo lado

El Cl está hacia arriba



El Me está hacia arriba

Confórmeros:



ISÓMERO TRANS:

Sustituyentes orientados hacia lados opuestos

El Cl está hacia arriba



El Me está hacia abajo

Confórmeros:

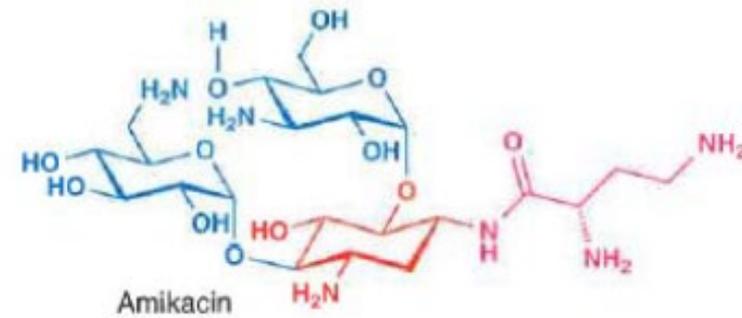
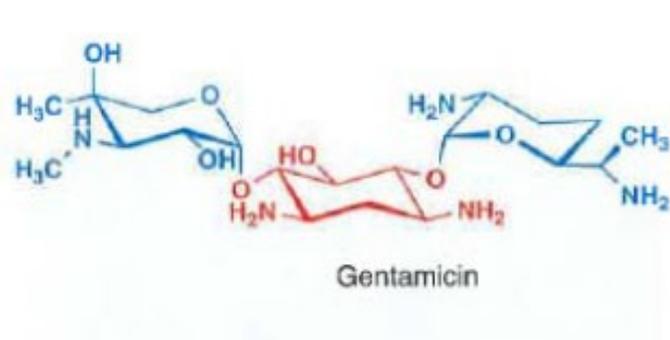


EJEMPLO: Analice que conformación es más estable en el (1R)-cloro-(3R)-metilciclohexano.

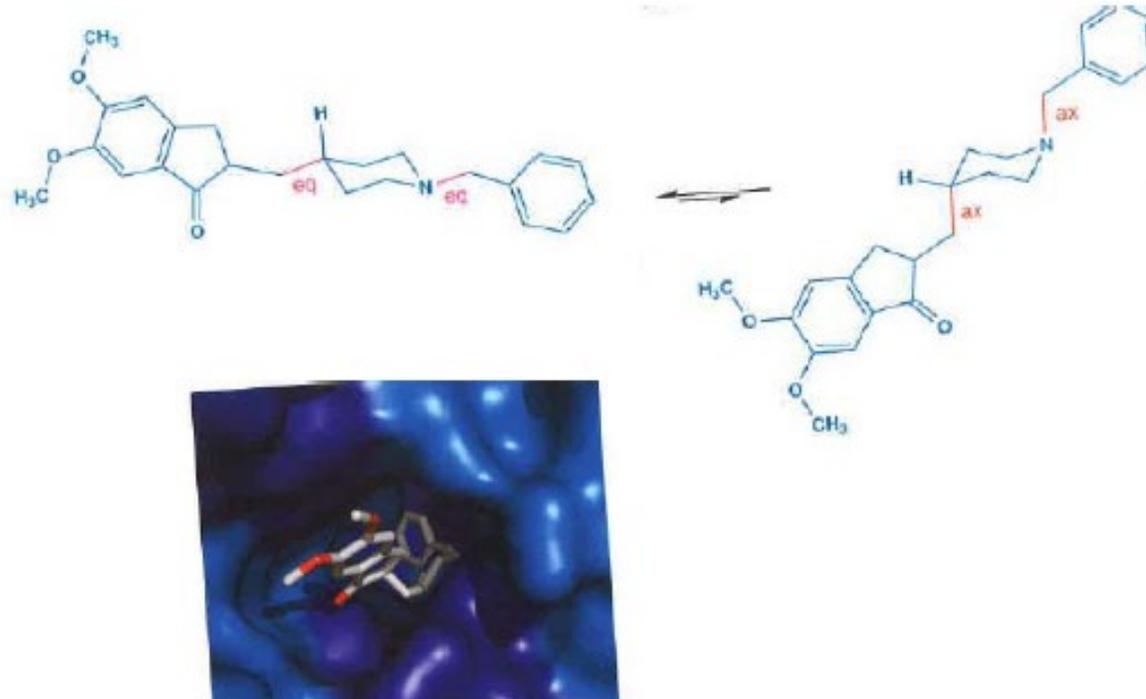
Sustituyente	Interacción 1,3-diaxial (kJ/mol)
-Cl	2,0
-OH	4,2
-CH ₃	7,6
-CH ₂ CH ₃	8,0
-CH(CH ₃) ₂	9,2
-C(CH ₃) ₃	22,8

IMPORTANCIA BIOLÓGICA DE LOS CONFÓRMEROS DE CICLOHEXANO:

Los aminoglucósidos son antibióticos que contienen un anillo de ciclohexano en su estructura. La conformación es determinante para su actividad antibacteriana.



El anillo de piperidina es un anillo de ciclohexano con un nitrógeno en su esqueleto. Se encuentra presente en múltiples productos naturales con actividad biológica.



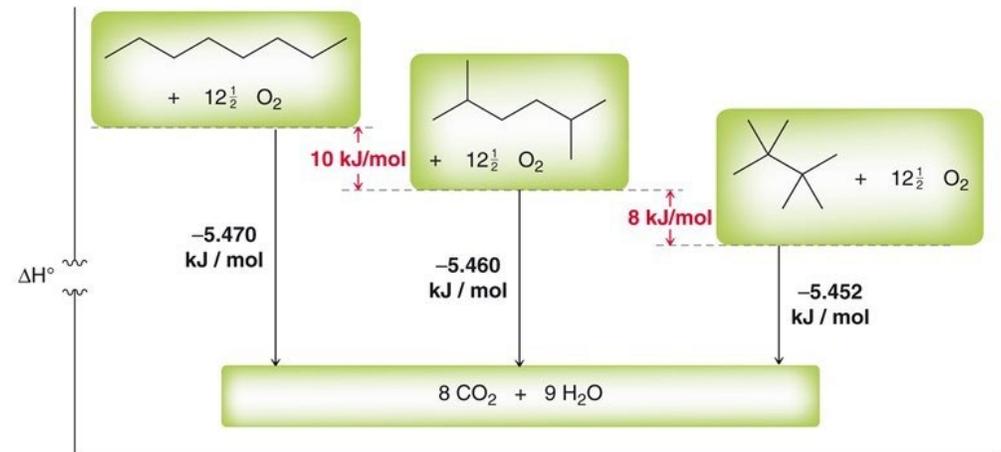
DONOZEPIL: si el fármaco tuviera mayoritariamente la conformación axial, no podría interaccionar con la enzima acetilcolinesterasa y no actuaría como inhibidor de la misma.

7. REACTIVIDAD

- Los alcanos son **MUY ESTABLES. MUY POCA REACTIVIDAD.**
- Los enlaces σ C-C y C-H son muy fuertes.
- Reacción principal: **combustión**

COMBUSTION

Es una oxidación rápida que transcurre a altas temperaturas, transformando los alcanos en CO_2 y H_2O y produciendo energía. Esta reacción se emplea para evaluar la estabilidad de estructuras isómeras de compuestos orgánicos: menor energía de combustión mayor estabilidad.



Gracias

Octubre 2021



**Universidad
Europea**

LAUREATE INTERNATIONAL UNIVERSITIES