**Tema 9 .- Hidrocarburos**

Los hidrocarburos son compuestos de carbono e hidrógeno que, atendiendo a la naturaleza de los enlaces, pueden clasificarse de la siguiente forma:

 ¦ Saturados ¦ Alcanos

 ¦ Alifáticos ¦

 ¦ ¦ ¦ Alquenos

 ¦ ¦ Insaturados ¦

Hidrocarburos ¦ ¦ Alquinos

 ¦

 ¦ Aromáticos

**ALCANOS**

El carbono se enlaza mediante orbitales híbridos sp3 formando 4 enlaces simples en disposición tetraédrica.

*Nomenclatura*
          1.- Cadena más larga: metano, etano, propano, butano, pentano,...
          2.- Las ramificaciones como radicales: metil(o), etil(o),...
          3.- Se numera para obtener los números más bajos en las ramificaciones.
          4.- Se escriben los radicales por orden alfabético y con los prefijos di-, tri-, ... si fuese necesario.
          5.- Los hidrocarburos cíclicos anteponen el prefijo ciclo-

*Propiedades físicas*

Las temperaturas de fusión y ebullición aumentan con el número de carbonos y son mayores para los compuestos lineales pues pueden compactarse mas aumentando las fuerzas intermoleculares.

Son menos densos que el agua y solubles en disolventes apolares.

*Propiedades químicas*

Son bastantes inertes debido a la elevada estabilidad de los enlaces C-C y C-H y a su baja polaridad. No se ven afectados por ácidos o bases fuertes ni por oxidantes como el permanganato. Sin embargo la combustión es muy exotérmica aunque tiene una elevada energía de activación.

Las reacciones más características de los alcanos son las de sustitución:

 CH4 + Cl2 ----> CH3Cl + HCl

También son importantes las reacciones de isomerización:

 AlCl3

 CH3CH2CH2CH3 ------> CH3CH(CH3)2

*Obtención de alcanos*

La fuente más importante es el petróleo y el uso principal la obtención de energía mediante combustión.

Algunas reacciones de síntesis a pequeña escala son:
          - Hidrogenación de alcanos:

 Ni

 CH3CH=CHCH3 -----> CH3CH2CH2CH3

          - Reducción de haluros de alquilo:

 Zn

 2 CH3CH2CHCH3 ------> 2 CH3CH2CH2CH3 + ZnBr2

**ALQUENOS**

Los alquenos contienen enlaces dobles C=C. El carbono del doble enlace tiene una hibridación sp2 y estructura trigonal plana. El doble enlace consta de un enlace sigma y otro pi. El enlace doble es una zona de mayor reactividad respecto a los alcanos. Los dobles enlaces son más estables cuanto más sustituidos y la sustitución en trans es más estable que la cis.

*Nomenclatura*
          1.- Seleccionar la cadena principal: mayor número de dobles enlaces y más larga. Sufijo -eno.
          2.- Numerar para obtener números menores en los dobles enlaces.

*Propiedades físicas*

Las temperaturas de fusión son inferiores a las de los alcanos con igual número de carbonos puesto que, la rigidez del doble enlace impide un empaquetamiento compacto.

*Propiedades químicas*

La reacciones más características de los alquenos son las de adición:

 CH3-CH=CH-CH3 + XY ------> CH3-CHX-CHY-CH3

entre ellas destacan la hidrogenación, la halogenación, la hidrohalogenación y la hidratación. En estas dos últimas se sigue la regla de Markovnikov y se forman los derivados más sustituidos, debido a que el mecanismo transcurre mediante carbocationes y se forma el carbocatión más estable que es el más sustituido.

Otra reacción importante es la oxidación con MnO4- o OsO4 que en frío da lugar a un diol y en caliente a la ruptura del doble enlace y a la formación de dos ácidos.

Otra característica química importante son las reacciones de polimerización. Mediante ellas se puede obtener una gran variedad de plásticos como el polietileno, el poliestireno, el teflón, el plexiglas, etc. La polimerización de dobles enlaces tiene lugar mediante un mecanismo de radicales libres.

*Obtención de alquenos*

Se basa en reacciones de eliminación, inversas a las de adición:

 CH3-CHX-CHY-CH3 ------> CH3CH=CHCH3 + XY

entre ellas destacan la deshidrogenación, la deshalogenación, la deshidrohalogenación y la deshidratación. Las deshidratación es un ejemplo interesante, el mecanismo transcurre a traves de un carbocatión y esto hace que la reactividad de los alcoholes sea mayor cuanto más sustituidos. En algunos casos se producen rearreglos de carbonos para obtener el carbocatión más sustituido que es más estable. De igual modo el alqueno que se produce es el más sustituido pues es el más estable. Esto provoca en algunos casos la migración de un protón.

**ALQUINOS**

Se caracterizan por tener enlaces triples. El carbono del enlace triple se enlaza mediante una hibridación sp que da lugar a dos enlaces simples sigma formando 180 grados y dos enlaces pi. El deslocalización de la carga en el triple enlace produce que los hidrógenos unidos a el tengan un carácter ácido y puedan dar lugar a alquiluros. El alquino más característico es el acetileno HCCH, arde con una llama muy caliente ( 2800oC) debido a que produce menos agua que absorbe menos calor.

Sus propiedades físicas y químicas son similares a las de los alquenos. Las reacciones más características son las de adición.

*Nomenclatura*
          1.- Se consideran como dobles enlaces al elegir la cadena principal.
          2.- Se numera dando preferencia a los dobles enlaces.

**Cadenas carbonadas**

El enorme conjunto de los compuestos orgánicos del carbono puede estudiarse atendiendo a las formas de los distintos «esqueletos» carbonados o cadenas de carbono. Estas cadenas de carbono llegan a formarse por la facilidad que presenta el carbono de poder unirse consigo mismo.

Los compuestos con un esqueleto en forma de cadena abierta se denominan **alifáticos** (del griego: *aleiphar = grasa*, ya que las grasas presentan esqueleto carbonado de este tipo).

Los compuestos orgánicos también pueden presentar estructuras en forma de ciclo, por ejemplo:

        

Se conocen dos clases de compuestos **cíclicos**: *alicíclicos* y *aromáticos*.

Los compuestos **alifáticos** sólo se diferencian de los **alicíclicos** en que estos últimos presentan la cadena cerrada. Los compuestos **aromáticos**, sin embargo, presentan estructuras especiales.

Tanto los compuestos alifáticos como los cíclicos pueden presentar ramificaciones en sus estructuras.

En las cadenas llamaremos:

* **Carbonos primarios**, a los que están unidos a un sólo átomo de carbono (no importa que el enlace sea simple o no);
* **Carbonos secundarios**, **terciarios** o **cuaternarios**, a los que están unidos respectivamente a dos, tres o cuatro átomos de carbono diferentes.

 **Representación de compuestos orgánicos**

Los compuestos químicos se pueden representar mediante las llamadas*fórmulas químicas*. El primer paso para el conocimiento de un compuesto es determinar su *composición cualitativa*, es decir, los elementos que lo constituyen, lo que se consigue mediante el llamado *análisis elemental cualitativo*. El conocimiento de la composición cualitativa es relativamente vago, en particular en Química orgánica, donde un elevado número de compuestos pueden tener la misma composición cualitativa. Este número se reduce enormemente cuando, mediante el llamado *análisis elemental cuantitativo*, se determina la *composición cuantitativa* de una sustancia, es decir, la relación en que se encuentran los elementos componentes de la misma.

El resultado del análisis elemental cuantitativo permite establecer la llamada *fórmula empírica*, formada por los símbolos de cada uno de los elementos componentes, a los que se añaden los subíndices enteros más pequeños, que indican la relación existente entre ellos. Así, por ejemplo, la fórmula empírica **CH2O** representa un compuesto formado por carbono, hidrógeno y oxígeno, en la proporción 1: 2: 1 (por sencillez, el subíndice 1 se omite en la fórmula empírica); pero estos números no indican necesariamente el número de átomos de cada elemento que forman la molécula, sino únicamente la relación en que se encuentran. Para conocer el número de átomos de cada elemento que forman la molécula, es decir, la llamada *fórmula molecular*, es necesario conocer el peso molecular de la sustancia en cuestión, que puede determinarse por diferentes métodos, como, por ejemplo, ebulloscopía, crioscopía, osmometría, densitometría, ultracentrifugación, etcétera.

La fórmula molecular no define unívocamente a un compuesto, en particular tratándose de compuestos orgánicos. Un determinado número de átomos pueden unirse entre sí de distintas formas para dar lugar a diferentes compuestos. Por ejemplo, la sencilla fórmula molecular **C2H4O2** puede corresponder a tres compuestos distintos: *ácido acético*, *formiato de metilo* y *aldehído glicólico*. Para poder identificar unívocamente un compuesto es necesario indicar los enlaces que existen entre los átomos que lo forman. Para ello, se utilizan las llamadas *fórmulas estructurales*, que pueden ser, principalmente, de tres tipos:

**1) Fórmulas condensadas**, llamadas también lineales y en las que los pares de electrones de cada enlace se representan por un trazo o guión, que une a los dos átomos correspondientes. En este tipo de fórmulas se suelen omitir algunos enlaces simples, en particular los enlaces **C—H**, e incluso, muchas veces, algunos dobles enlaces, poniendo los átomos ordenados para dar idea de su forma de enlace. Por ejemplo:

**CH2=CH2 ,     CH2Cl—CH3 ,     CH2OH—CHO**

**2)** **Fórmulas expandidas**, o fórmulas planas, en las que se representan en el plano todos los enlaces. Por ejemplo:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| fcetano.gif (1328 bytes)  | fibutano.gif (1372 bytes) | festerpm.gif (626 bytes) |

Es muy frecuente en Química orgánica utilizar una mezcla de las fórmulas condensadas y expandidas, representando sólo por trazos los enlaces más importantes o los que   tengan interés en cada tipo de reacción.

**3) Fórmulas tridimensionales**, en las que se representan las direcciones de los enlaces en el espacio mediante distintos tipos de proyecciones. Entre las más usadas se encuentran la proyección en caballete, proyección de Newman y proyección de enlaces convencionales. La siguiente figura muestra estos tres tipos de representación aplicados a la molécula de etano **(C2H6)**:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| cetcaal.gif (651 bytes) | cetnwal.gif (744 bytes) | cetecal.gif (805 bytes) |
| Proyección encaballete | Proyección modificadade Newman | Proyección deenlaces convencionales |

Las fórmulas anteriores son las más corrientes en Química orgánica, si bien existen otros tipos de representaciones especiales, utilizados para poner de manifiesto algunas propiedades particulares, como son, por ejemplo, los llamados diagramas moleculares, en los que se indican numéricamente las longitudes y ángulos de enlace, e incluso la densidad de carga electrónica sobre cada átomo, resultado de complicados cálculos mecanocuánticos.

Además de estos tipos de fórmulas, en Química orgánica son muy utilizados los llamados **modelos moleculares**, que son insustituibles para poder visualizar de forma muy clara la estructura geométrica de las moléculas. Los modelos moleculares más utilizados son los llamados de **bolas y varillas**, en los que las distancias de enlace están aumentadas en relación con el tamaño de los átomos, resaltando así los ángulos de enlace y simetría molecular, y los llamados **modelos de esferas interpenetradas**, que proporcionan una representación real de las moléculas, poniendo claramente de manifiesto las relaciones espaciales, tanto entre los átomos enlazados como entre los no enlazados:

|  |
| --- |
| **Modelos moleculares del etano** |

|  |  |
| --- | --- |
| http://www.juntadeandalucia.es/averroes/recursos_informaticos/concurso1998/accesit8/imagenes/iet364.gif | http://www.juntadeandalucia.es/averroes/recursos_informaticos/concurso1998/accesit8/imagenes/ietei.gif |
| Modelo de bolas y varillas | Modelo de esferas interpenetradas |

El conocimiento de la estructura molecular es de suma importancia y constituye, en la actualidad, uno de los principales temas de investigación de numerosos químicos, puesto que todas las propiedades fisicoquímicas de una sustancia dependen de su estructura molecular. Por otro lado, el conocimiento de la estructura molecular de un compuesto es el punto de partida para su *síntesis* en el laboratorio y posteriormente en la industria, por lo que constituye la base de muchas de las ramas de la técnica actual. Desde la fabricación de nuevos *plásticos* y *fibras sintéticas* hasta la de productos farmacológicos están basadas en gran parte en los conocimientos adquiridos en el análisis estructural. Toda esta investigación se realiza, hoy en día, con la ayuda de potentes ordenadores, que permiten la creación de auténticos "modelos virtuales" de las moléculas, los cuales, dotados de animación, llevan los límites del realismo a extremos insospechados. Como muestra (y salvando distancias) podemos ver el efecto que se consigue dotando de animación a los dos modelos moleculares anteriores:

|  |
| --- |
| **Animaciones de modelos moleculares del etano**(rotación de 360º sobre el eje Y) |

|  |  |
| --- | --- |
| etano364.gif (77217 bytes) | http://www.juntadeandalucia.es/averroes/recursos_informaticos/concurso1998/accesit8/imagenes/ieteian.gif |
| Modelo de bolas y varillas | Modelo de esferas interpenetradas |