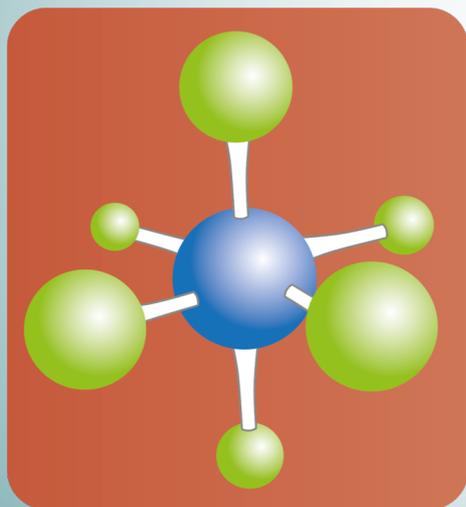


Química

BLOQUE III

TEMA 8: HIDROCARBUROS



Ana Carmen Perdigón Aller
Marina González Barriuso
Miguel García Iglesias

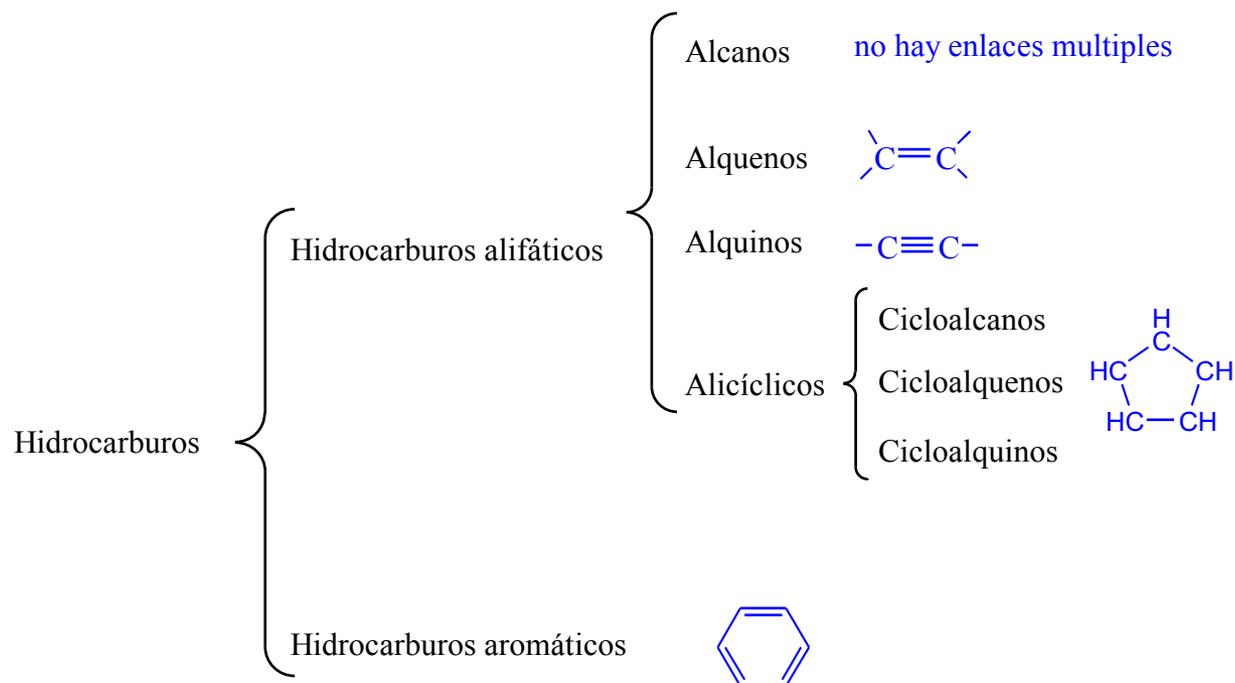
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA E INGENIERÍA
DE PROCESOS Y RECURSOS

Este material se publica bajo la siguiente licencia:

[Creative Commons BY-NC-SA 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/)

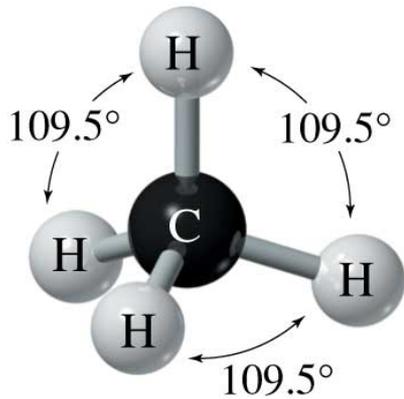


Los compuestos que contienen sólo carbono e hidrógeno se denominan hidrocarburos. Los alcanos contienen enlaces sencillos C-C y se dice que están saturados, los alquenos poseen enlaces dobles C=C y los alquinos tienen enlaces triples C≡C. El término hidrocarburo aromático se utiliza frecuentemente para indicar la presencia de un anillo de benceno.

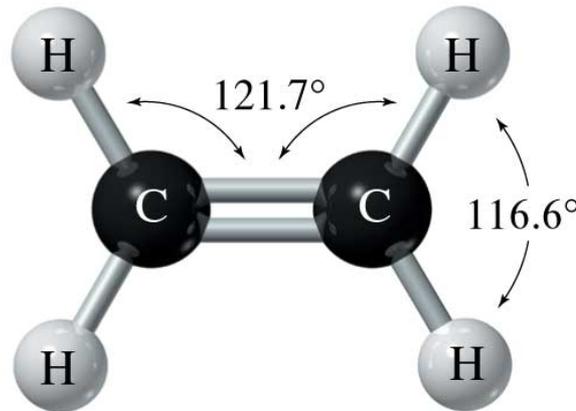


Estructuras del metano, el etileno y el acetileno.

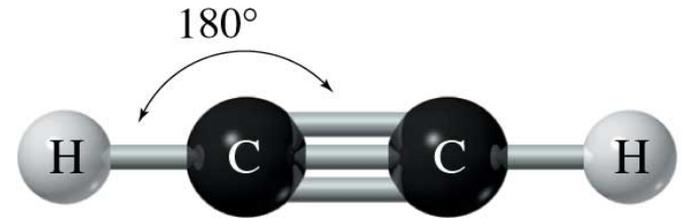
Los ángulos entre los orbitales p son todos de 90° , pero pocos compuestos orgánicos tienen ángulos de enlace de 90° . Sus ángulos de enlace normalmente están próximos a 109° , 120° o 180° .



metano, 109.5°



etileno, próximo a 120°

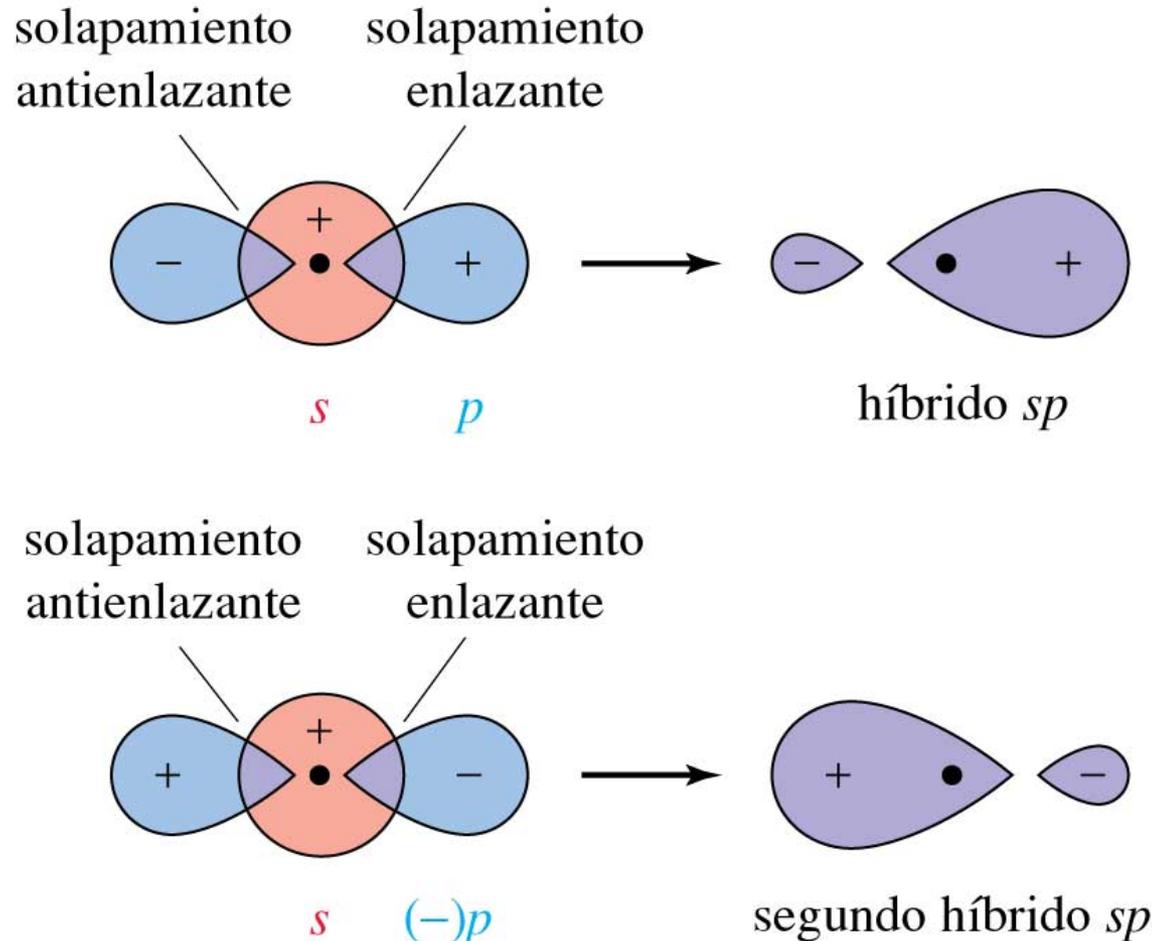


acetileno, 180°

El ángulo de enlace de los orbitales híbridos sp^3 es 109.5° ; el ángulo de enlace para los orbitales híbridos sp^2 está alrededor de 120° ; el ángulo de enlace para los orbitales híbridos sp es de 180° .

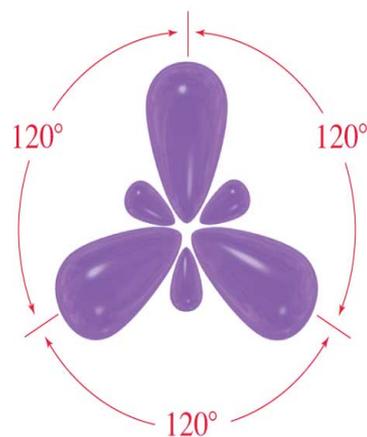
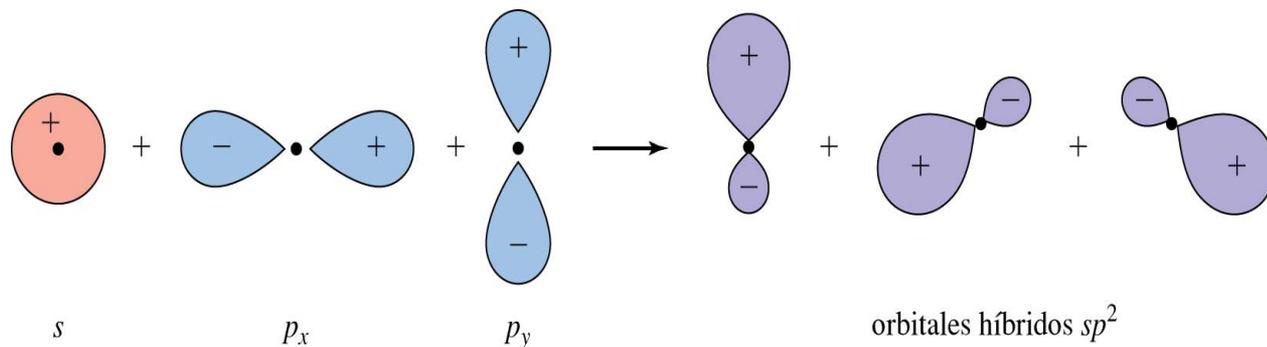
Orbitales híbridos sp .

La adición de un orbital s a un orbital p da lugar a un orbital atómico híbrido sp , con la mayoría de la densidad electrónica a un lado del núcleo. La adición al orbital s del orbital p , de fase opuesta a la del orbital p anterior, da lugar a otro orbital atómico híbrido sp , con la mayor parte de su densidad electrónica en el lado opuesto del núcleo en el que se sitúa el primer híbrido.

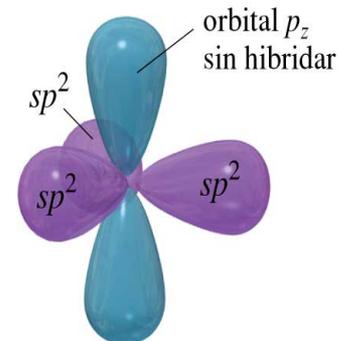


Orbitales híbridos sp^2 .

La hibridación de un orbital s con dos orbitales p da un conjunto de tres orbitales híbridos sp^2 . Los ángulos de enlace asociados a esta disposición trigonal son aproximadamente de 120° . El orbital p que sobra es perpendicular al plano que forman los tres orbitales híbridos.



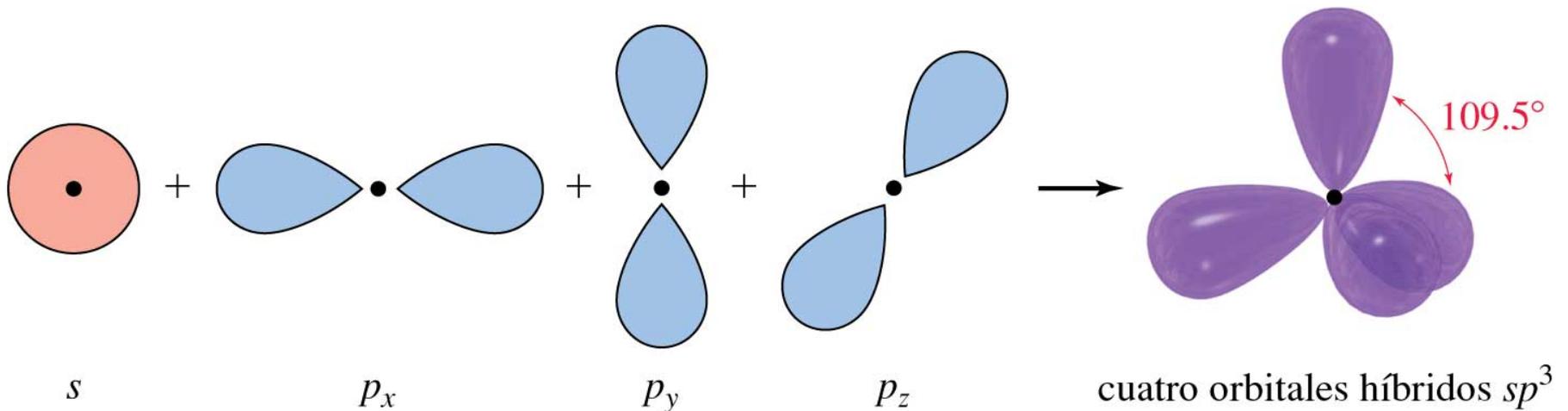
representación de los tres orbitales híbridos sp^2 superpuestos



átomo de carbono con hibridación sp^2 (visto lateralmente)

Orbitales híbridos sp^3 .

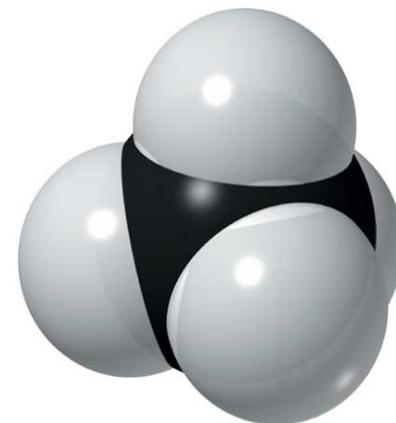
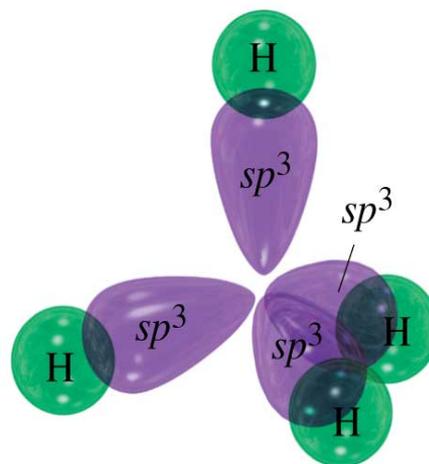
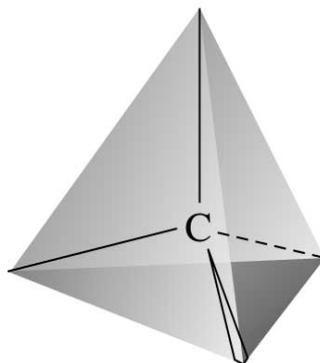
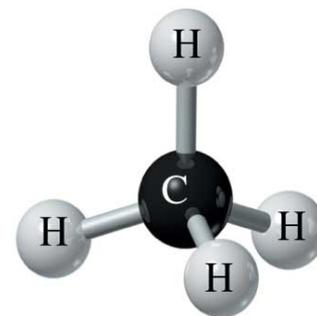
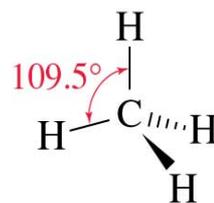
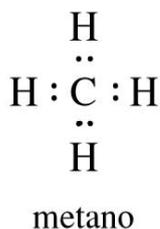
La hibridación de un orbital s con los tres orbitales p da lugar a cuatro orbitales híbridos sp^3 con geometría tetraédrica y ángulos de enlace de 109.5° .



Cada orbital híbrido sp^3 se orienta hacia las esquinas del tetraedro en un ángulo de 109.5° uno respecto al otro

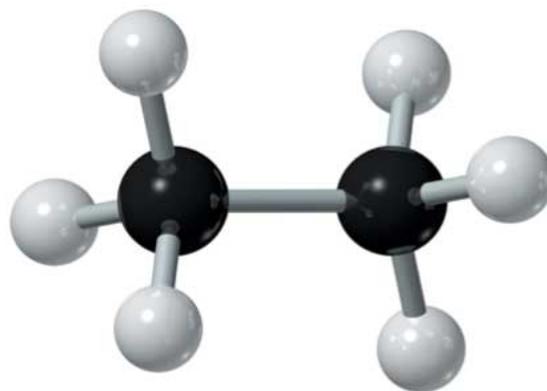
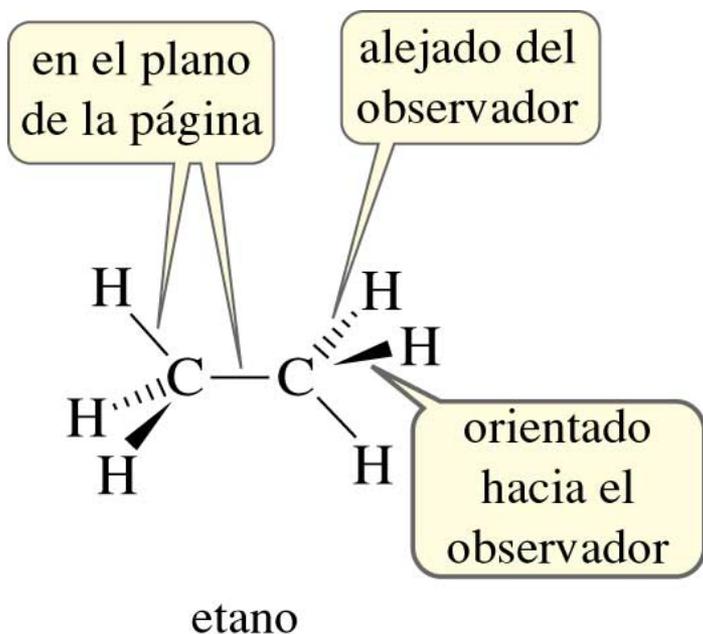
Representaciones del metano.

El metano tiene geometría tetraédrica, al usar cuatro orbitales híbridos sp^3 para formar enlaces sigma con los cuatro átomos de hidrógeno



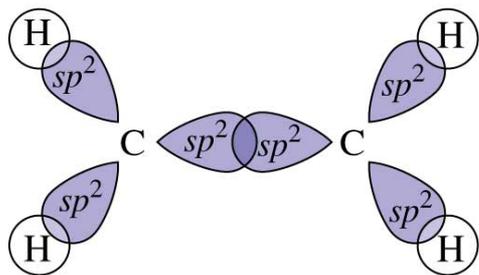
Representación de estructuras tridimensionales.

La estructura tridimensional del etano, C_2H_6 , tiene la forma de dos tetraedros unidos. Cada átomo de carbono tiene hibridación sp^3 , con cuatro enlaces sigma formados por los cuatro orbitales híbridos sp^3 . Los trazos de rayas paralelas representan enlaces que se alejan del observador, los enlaces representados por cuñas se orientan hacia el observador y las otras líneas de enlace, rectas, están en el plano de la página. Todos los ángulos de enlace tienen un valor próximo a 109.5° .

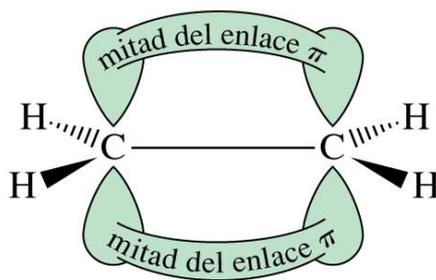


Enlace del etileno.

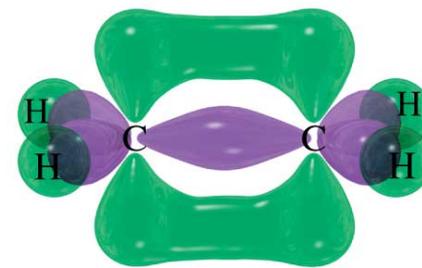
Los átomos de carbono en el etileno tienen hibridación sp^2 , con ángulos de enlace trigonales de aproximadamente 120° . El enlace triple contiene un enlace sigma y dos enlaces pi perpendiculares.



estructura de los enlaces σ
(vista desde encima del plano)



enlace π
(vista a lo largo del plano)

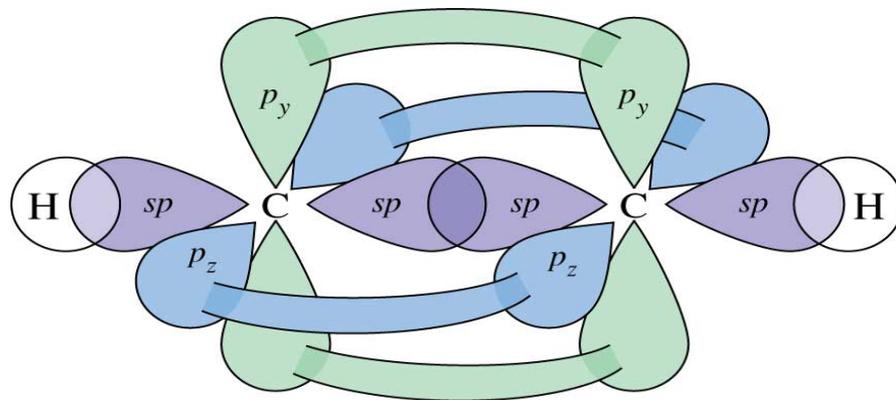


etileno

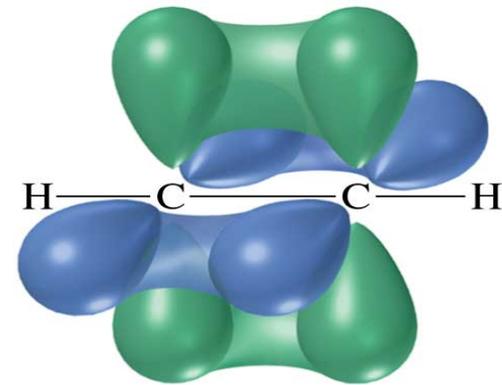
El etileno tiene tres enlaces sigma formados por sus orbitales híbridos sp^2 en una geometría trigonal. El orbital p sin hibridar de un átomo de carbono es perpendicular a sus orbitales híbridos sp^2 y es paralelo al orbital p sin hibridar del segundo átomo de carbono. El solapamiento de estos dos orbitales p produce un enlace pi (enlace doble) que se encuentra situado por encima y por debajo del enlace sigma

Enlace del acetileno

Los átomos de carbono del acetileno tienen hibridación sp , con ángulos de enlace lineales (180°). El triple enlace contiene un enlace sigma y dos enlaces pi perpendiculares



acetileno

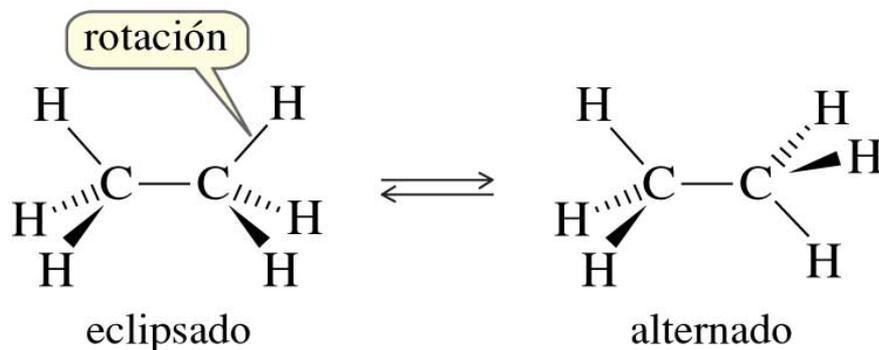
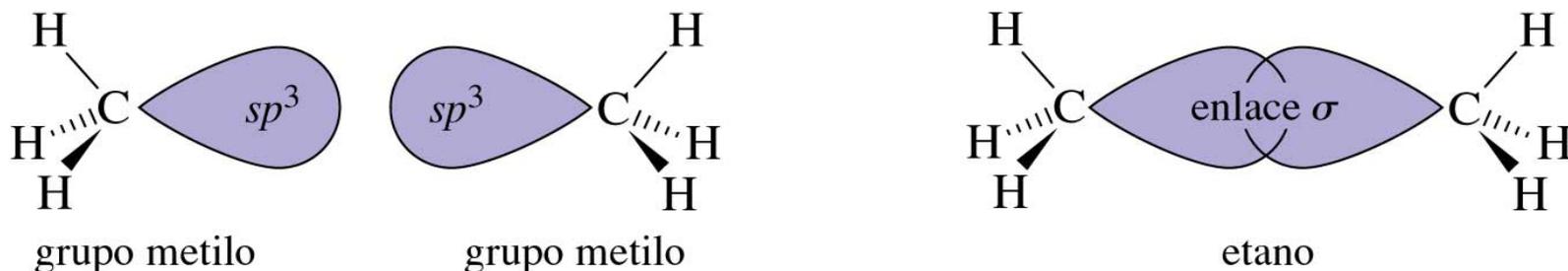


acetileno

El acetileno tiene dos enlaces sigma formados por su orbital híbrido sp en una geometría lineal. Los dos orbitales p sin hibridar de uno de los átomos de carbono son perpendiculares a su orbital híbrido sp y son paralelos a los orbitales p sin hibridar del segundo carbono. El solapamiento de estos cuatro orbitales p producirá dos enlaces pi (enlace triple) que se encuentran situados por encima y por debajo del enlace sigma

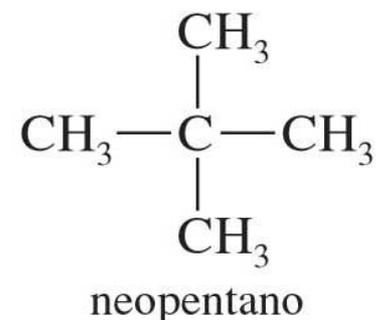
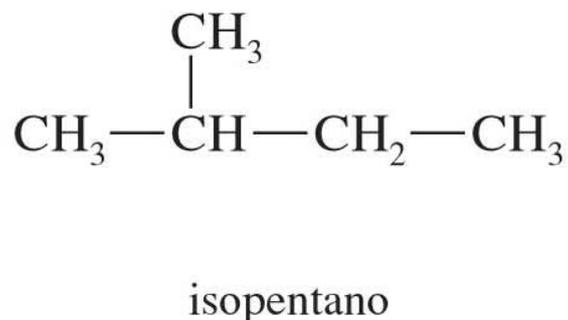
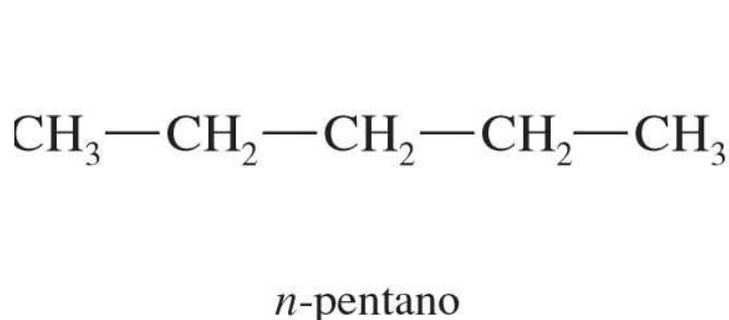
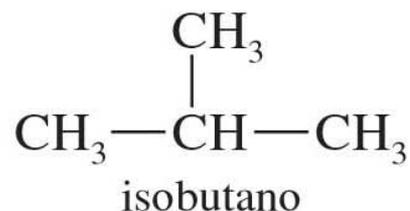
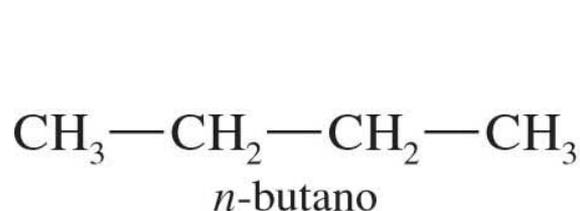
Enlace del etano.

El etano está formado por dos grupos metilo enlazados mediante el solapamiento de sus orbitales híbridos sp^3 . Estos grupos metilo pueden rotar uno respecto al otro.



Isómeros constitucionales.

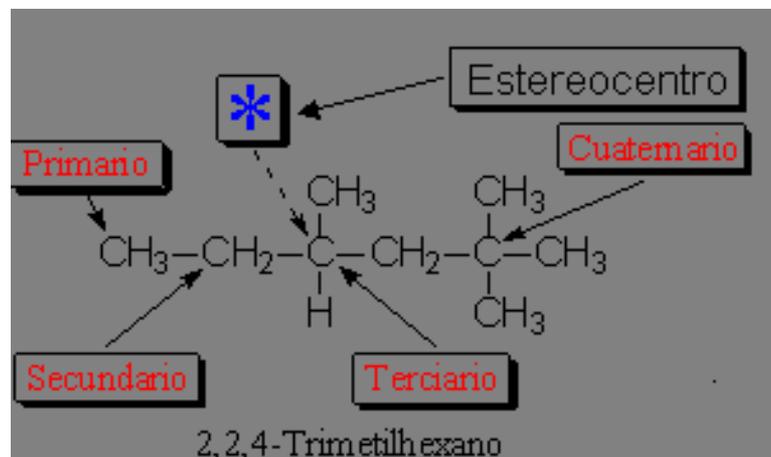
Si se pide representar una fórmula estructural para el C_4H_{10} , cualquiera de las siguientes son correctas. De la misma forma, hay tres isómeros constitucionales del pentano (C_5H_{12}), que reciben los nombres de *n*-pentano, isopentano y neopentano. El número de isómeros aumenta rápidamente a medida que aumenta el número de átomos de carbono.



El número de isómeros crece rápidamente con el número de átomos de carbono del alcano

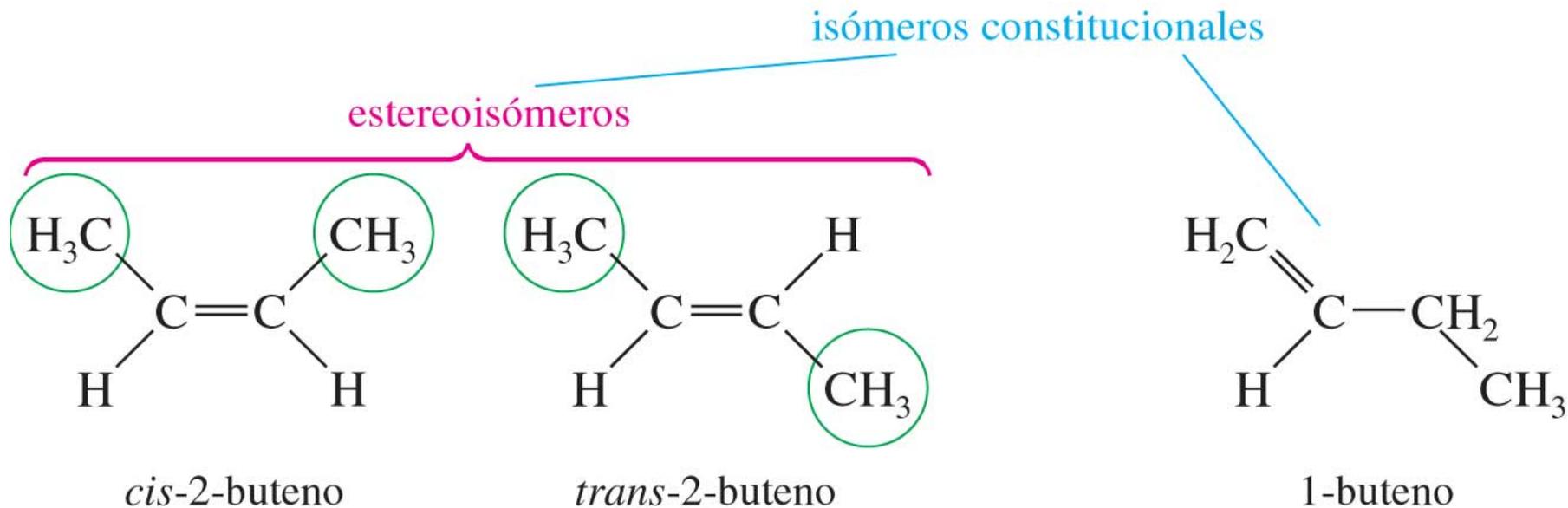
Número átomos C	Posibles Isómeros
1-3	1
4	2
5	3
6	5
7	9
8	18
9	35
10	75
15	4347
20	366319

Tipos de átomos de carbono según la sustitución



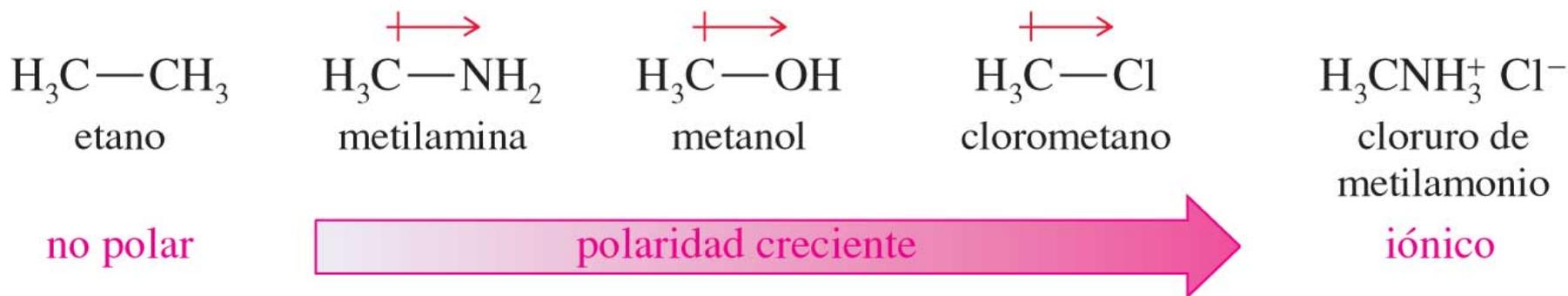
Isómeros geométricos: *cis* y *trans*.

Los estereoisómeros son compuestos con los átomos unidos en el mismo orden, pero sus átomos tienen distintas orientaciones en el espacio. *Cis* y *trans* son ejemplos de estereoisómeros geométricos y se producen cuando hay un enlace doble en el compuesto. Dado que no hay rotación libre a lo largo del enlace doble carbono-carbono, los grupos de estos carbonos pueden señalar distintos sitios en el espacio.



Momentos dipolares.

Existen enlaces con polaridad muy variada. Así, podemos encontrar desde enlaces covalentes no polares y enlaces covalentes polares, hasta enlaces totalmente iónicos. En los ejemplos siguientes, el etano tiene un enlace covalente no polar C-C. La metilamina, el metanol y el clorometano tienen enlaces covalentes cada vez más polares (C-N, C-O y C-Cl). El cloruro de metilamonio ($\text{CH}_3\text{NH}_3^+\text{Cl}^-$) tiene un enlace iónico entre el ión metilamonio y el ión cloruro.

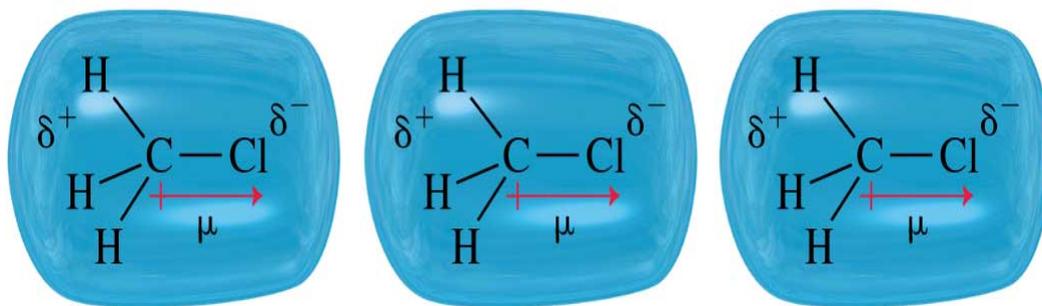


La polaridad de un enlace aumenta a medida que la electronegatividad de uno de los átomos implicados en un enlace covalente aumenta. El momento dipolar del enlace es una medida de la polaridad de un enlace.

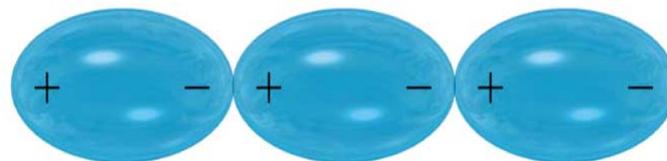
Interacción dipolo-dipolo.

Las interacciones dipolo-dipolo son el resultado de la aproximación de dos moléculas polares. Si sus extremos positivo y negativo se acercan, la interacción es atractiva. Si se acercan dos extremos negativos o dos extremos positivos, la interacción es repulsiva. En un líquido o en un sólido, las moléculas están orientadas de tal forma que el extremo positivo del dipolo se aproxima al extremo negativo del dipolo de una molécula vecina y la fuerza resultante es de atracción.

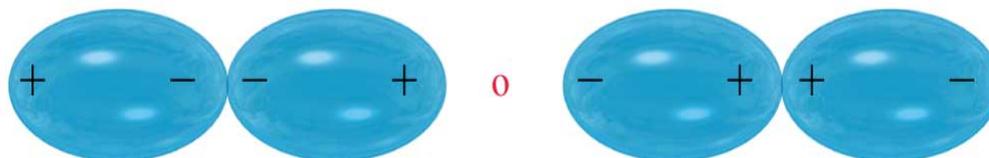
atracción (común)



simbolizado por



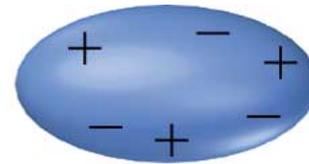
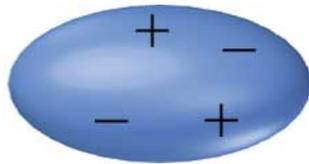
repulsión (no común)



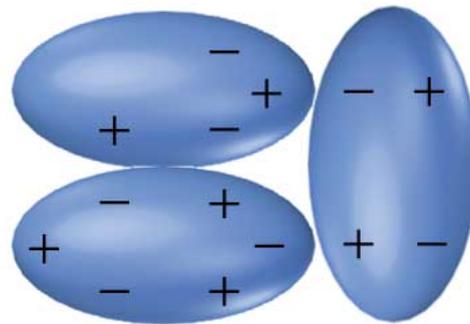
Fuerzas de dispersión de London.

Las fuerzas de dispersión de London se forman debido a la atracción de dipolos temporales complementarios

Un momento dipolar temporal en una molécula puede inducir a un momento dipolar temporal en una molécula vecina. Una interacción atractiva dipolo-dipolo puede durar sólo una fracción de segundo.



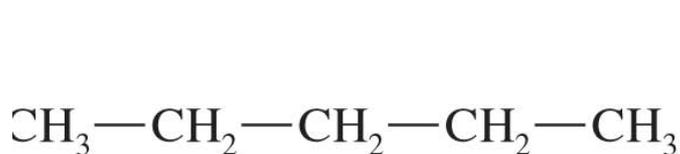
distribución al azar de los dipolos temporales cuando las moléculas están separadas



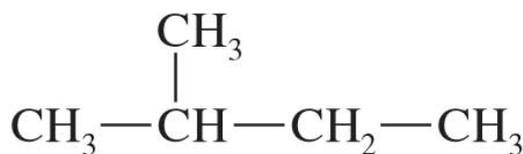
dipolos temporales complementarios cuando las moléculas están en contacto

Efecto de las ramificaciones en el punto de ebullición.

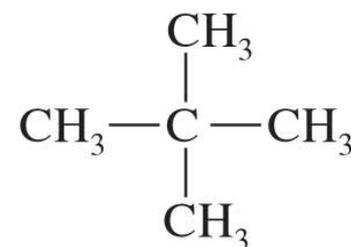
Se muestran los puntos de ebullición de tres isómeros de fórmula molecular C_5H_{12} . El isómero de cadena larga (*n*-pentano) es el que tiene mayor área superficial y el punto de ebullición más alto. A medida que las ramificaciones de la cadena aumentan, las moléculas se hacen más esféricas y su área superficial disminuye. El isómero que tiene más ramificaciones (neopentano) tiene el área superficial más pequeña y el punto de ebullición más bajo.



n-pentano, pe = 36°C



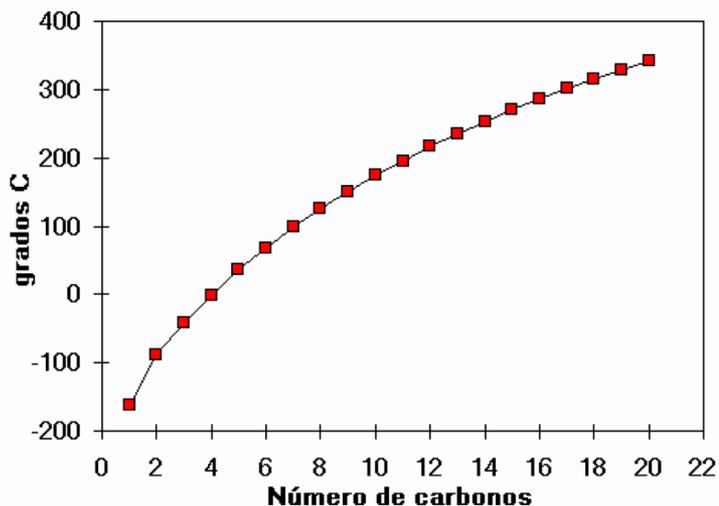
isopentano, pe = 28°C



neopentano, pe = 10°C

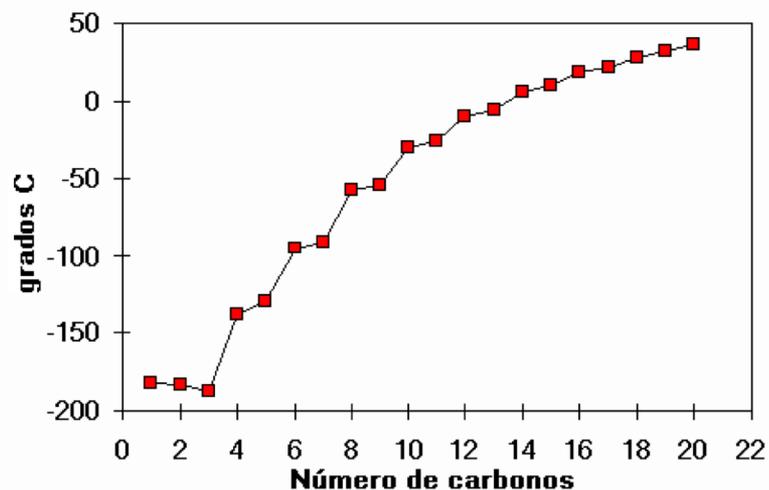
Las áreas de mayor superficie en la molécula son idóneas para las fuerzas de dispersión de London. Las ramificaciones en una molécula reducirán su área de superficie, disminuyendo la cantidad de fuerzas de dispersión de London. Los hidrocarburos tienden a tener puntos de ebullición más elevados que sus isómeros ramificados debido a este motivo.

Punto de ebullición



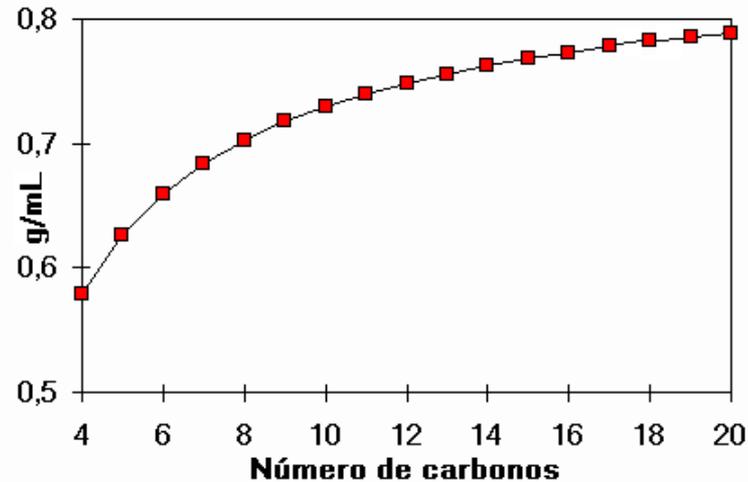
El punto de ebullición aumenta con el tamaño del alcano porque las fuerzas intramoleculares atractivas (**fuerzas de van der Waals y de London**) son más efectivas cuanto mayor es la superficie de la molécula.

Punto de fusión



El punto de fusión también aumenta con el tamaño del alcano por la misma razón. Los alcanos con número de carbonos impar se empaquetan peor en la estructura cristalina y poseen puntos de fusión un poco menores de lo esperado.

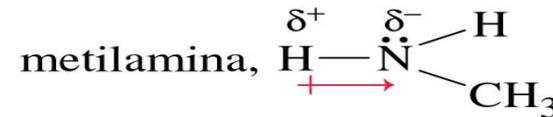
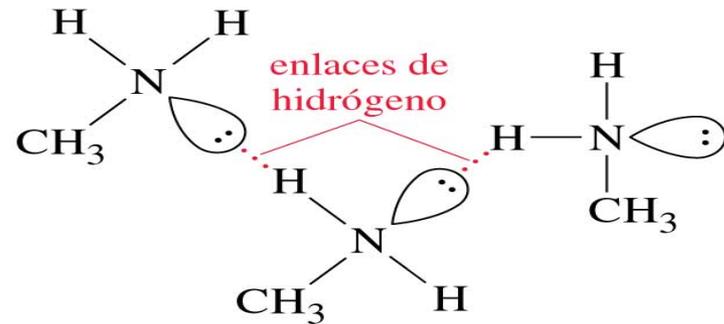
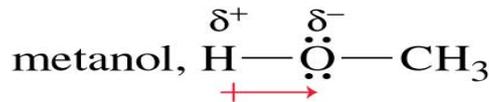
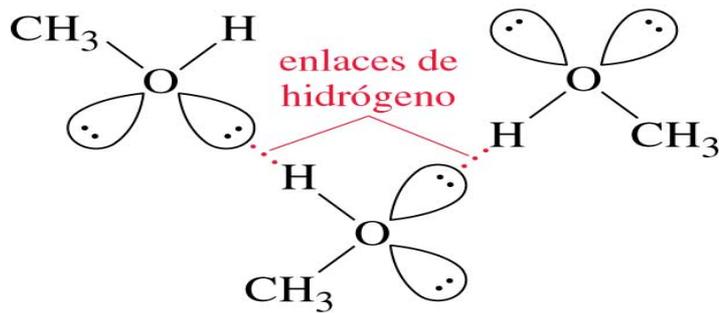
Densidad



Cuanto mayor es el número de carbonos las fuerzas intermoleculares son mayores y la cohesión intermolecular aumenta, resultando en un aumento de la proximidad molecular y, por tanto, de la densidad. Nótese que en todos los casos es inferior a uno.

Enlace de hidrógeno.

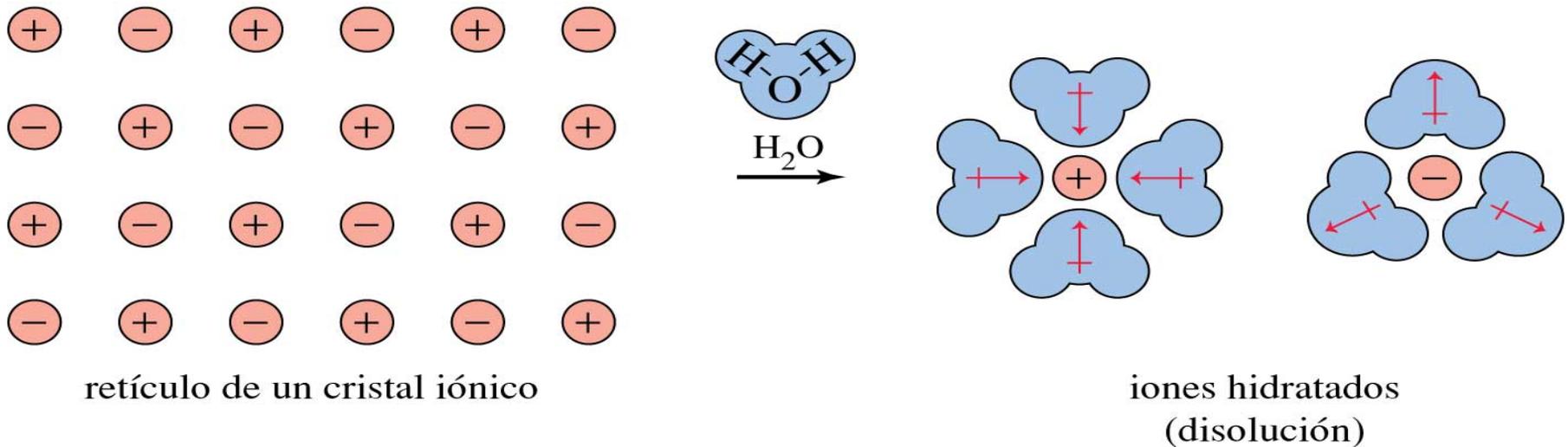
El enlace de hidrógeno es una atracción intermolecular fuerte entre un átomo de hidrógeno electrofílico O-H o N-H, y un par de electrones no enlazantes



El enlace de hidrógeno es una interacción intermolecular que se da en los compuestos con enlaces N-H y O-H. El fuerte enlace polar entre el hidrógeno y el heteroátomo hace que el hidrógeno interactúe con los pares solitarios del heteroátomo en las moléculas vecinas. La presencia de enlace de hidrógeno aumentará el punto de ebullición del compuesto porque se necesitará más energía para romper esta interacción y evaporar el compuesto. El enlace de hidrógeno O-H es más fuerte que el enlace de hidrógeno N-H.

Soluto polar en disolvente polar (se disuelve).

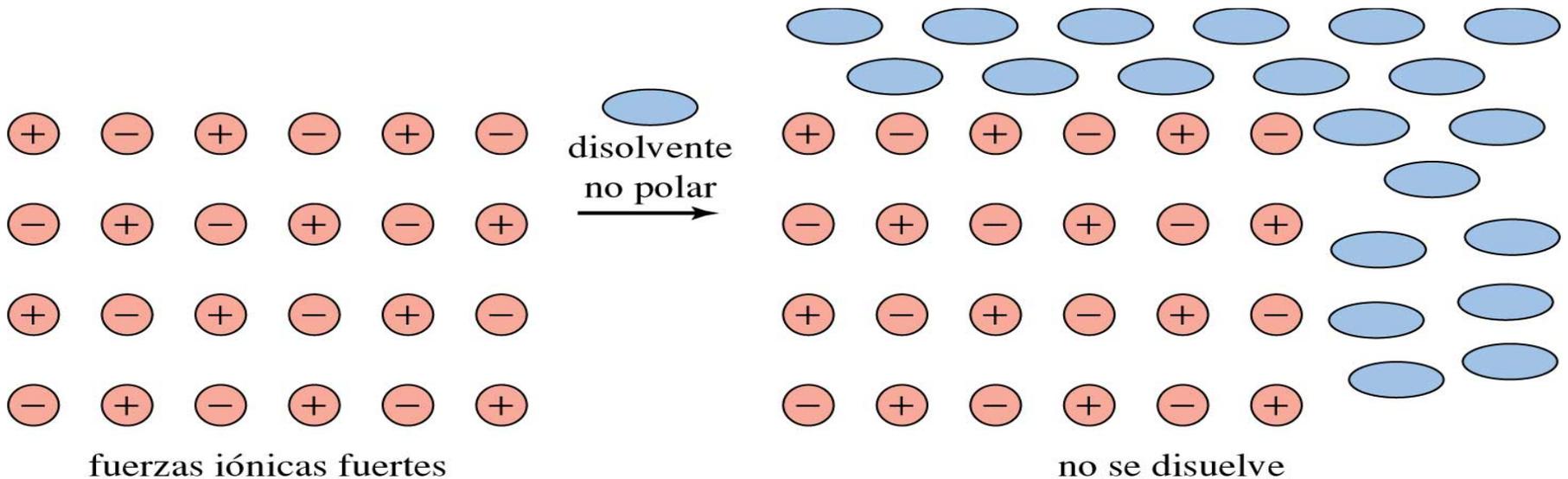
La hidratación de los iones sodio y cloruro por moléculas de agua vence la energía reticular del cloruro de sodio. La sal se disuelve.



Las moléculas de agua rodearán a los iones de sodio y cloruro disolviéndolos de forma efectiva.

Soluto polar en disolvente no polar (no se disuelve).

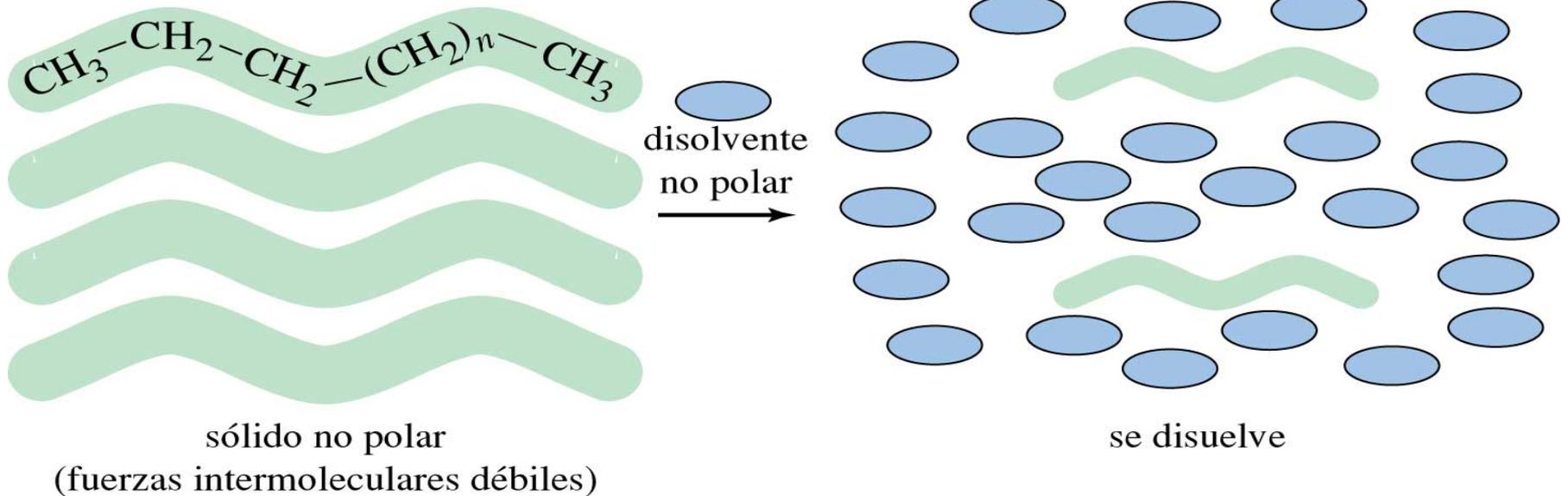
Las atracciones "intermoleculares" de las sustancias polares son más fuertes que las atracciones ejercidas por moléculas de disolventes no polares. Es decir, una sustancia polar no se disuelve en un disolvente no polar.



El disolvente no puede interrumpir la interacción intermolecular del soluto, por lo que el sólido no se disolverá en el disolvente.

Soluto no polar en disolvente no polar (se disuelve).

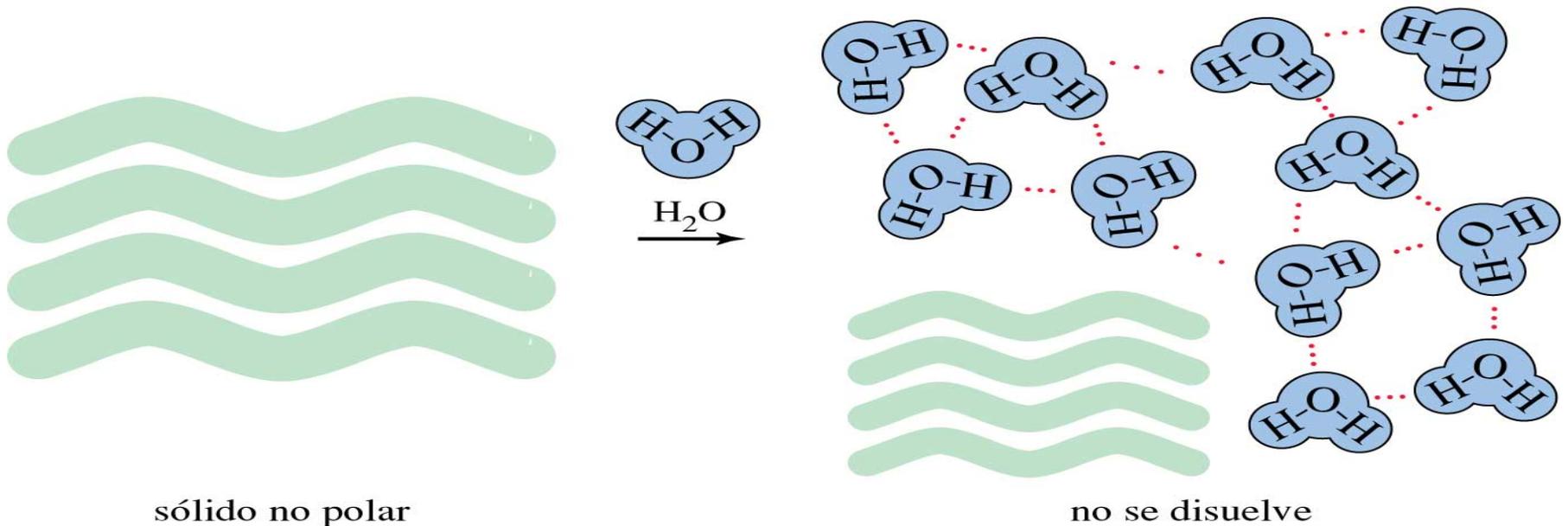
Las atracciones intermoleculares débiles de una sustancia no polar son vencidas por las atracciones débiles ejercidas por un disolvente no polar. La sustancia no polar se disuelve.



El disolvente puede interaccionar con las moléculas del soluto, separándolas y rodeándolas. Esto hace que el soluto se disuelva en el solvente

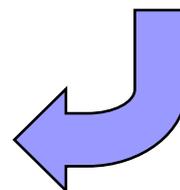
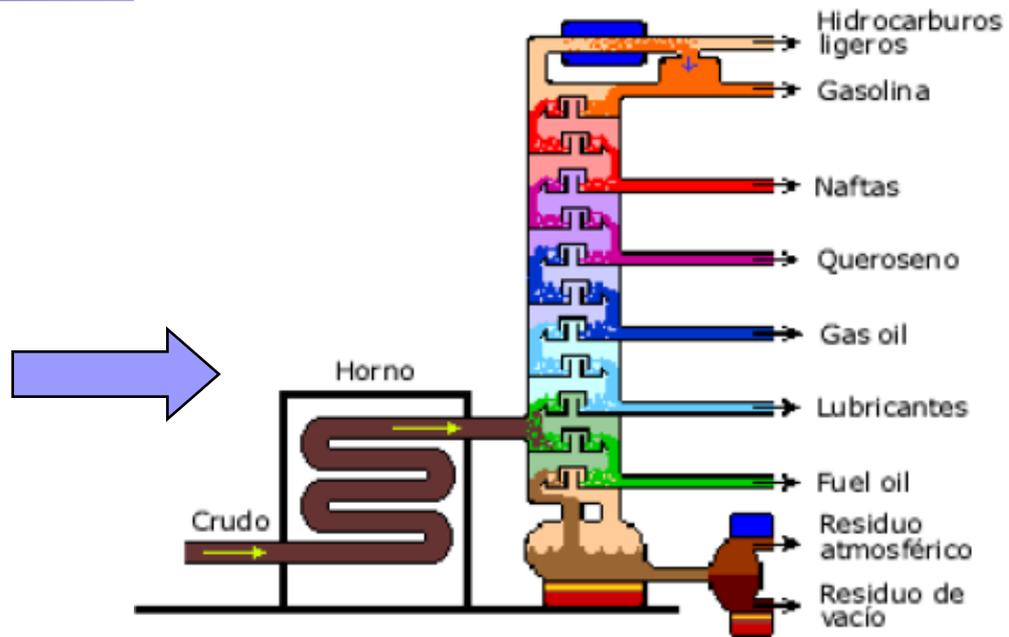
Soluto no polar en disolvente polar (no se disuelve)

Para que una molécula no polar se disolviera en agua debería romper los enlaces de hidrógeno entre las moléculas de agua, por lo tanto, las sustancias no polares no se disuelven en agua.

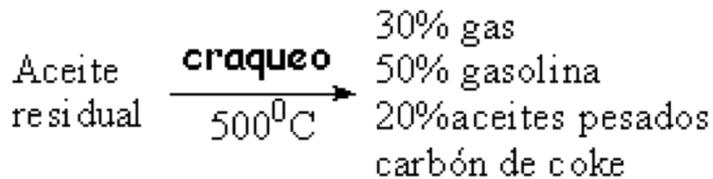


El enlace de hidrógeno es una interacción mucho más fuerte que la interacción entre un soluto no polar y el agua, por lo que es difícil que el soluto destruya las moléculas de agua. Por tanto, un soluto no polar no se disolverá en agua.

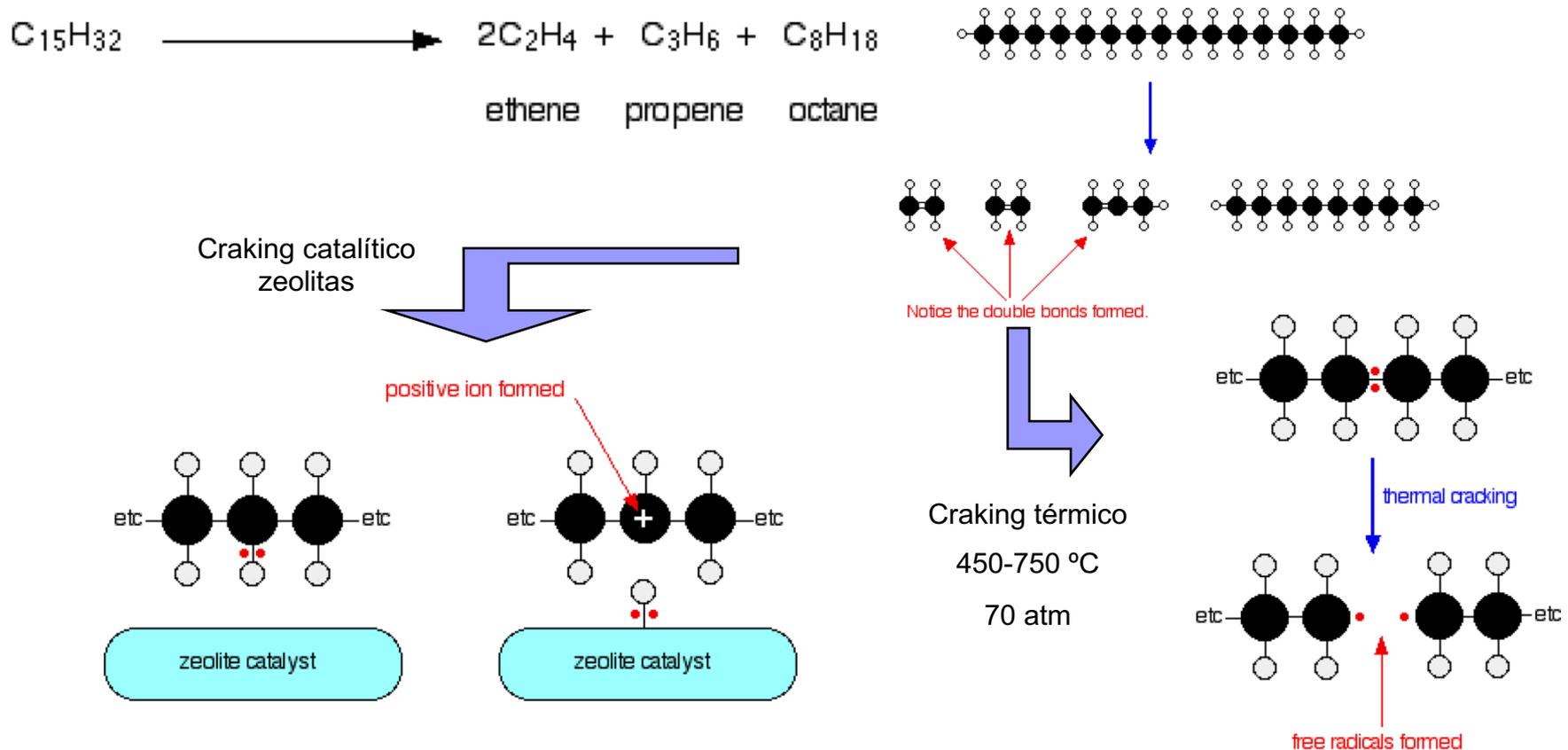
PETRÓLEO



Cantidad (%Volumen)	Punto de ebullición (°C)	Atomos de carbono	Productos
1-2	<30	1-4	Gas natural, metano, propano, butano, gas licuado
15-30	30-200	4-12	Eter de petróleo (C _{5,6}), ligroína (C ₇), nafta, gasolina cruda
5-20	200-300	12-15	Queroseno
10-40	300-400	15-25	Gas-oil, Fuel-oil, aceites lubricantes, ceras, asfaltos
8-69	>400	>25	Aceite residual, parafinas, brea



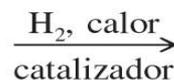
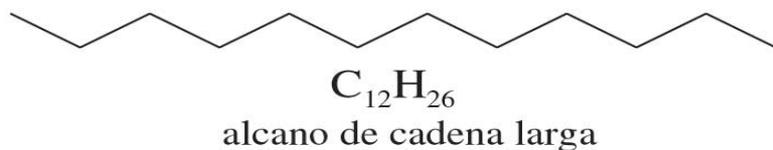
El **craqueo** es el proceso por el que se rompen químicamente las moléculas de hidrocarburo más grandes y complejas en otras más pequeñas y simples, para incrementar el rendimiento de obtención de gasolina a partir del petróleo. El craqueo se realiza mediante la aplicación de calor y presión y, más modernamente, mediante el uso de catalizadores apropiados (zeolitas, etc.)



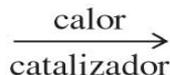
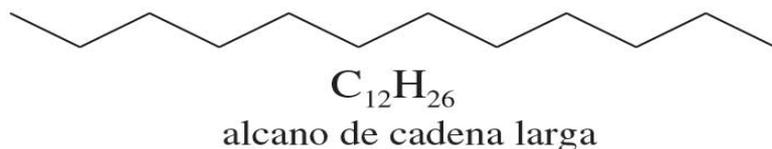
Cracking e hidrocracking.

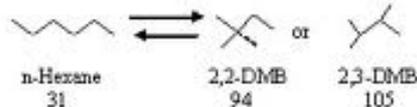
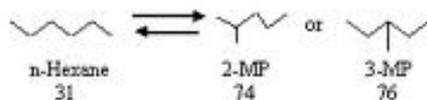
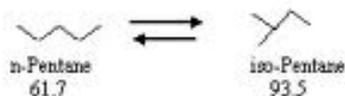
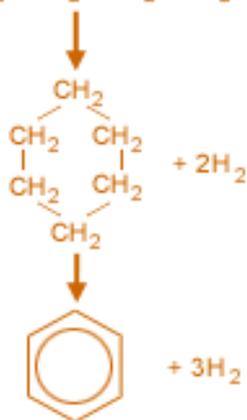
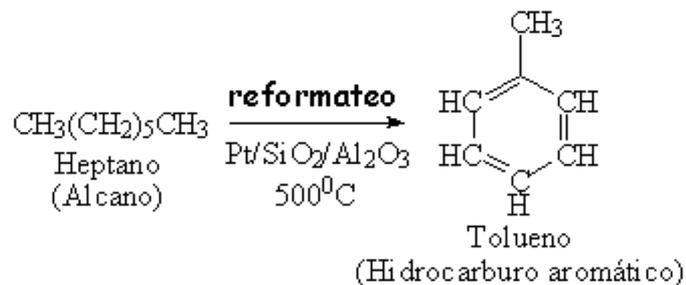
El *cracking* catalítico, a altas temperaturas, de los hidrocarburos de cadena larga da lugar a hidrocarburos de menor número de átomos de carbono. Normalmente el proceso del *cracking* se hace bajo unas condiciones que den un rendimiento máximo en gasolina. En el *hidrocracking* se añade hidrógeno para obtener hidrocarburos saturados. El *cracking* sin hidrógeno da mezclas de alcanos y alquenos.

Hidrocracking catalítico



Cracking catalítico





El **reforming** es un proceso por el que las moléculas lineales de hidrocarburos se ciclan pudiendo llegar a convertirse en hidrocarburos aromáticos

Isomerización proceso en el que las moléculas lineales de hidrocarburos se ramifican

El objetivo es aumentar el índice de octanos de la gasolina

Hexano 25

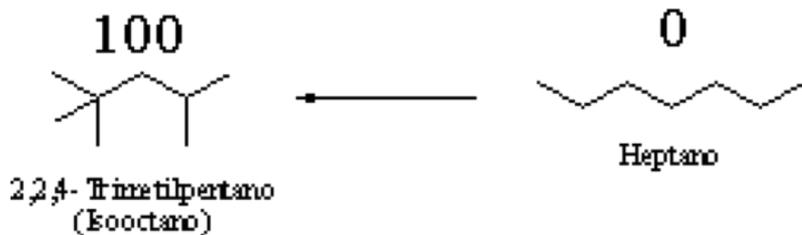
Ciclohexano 83

Isooctano 100

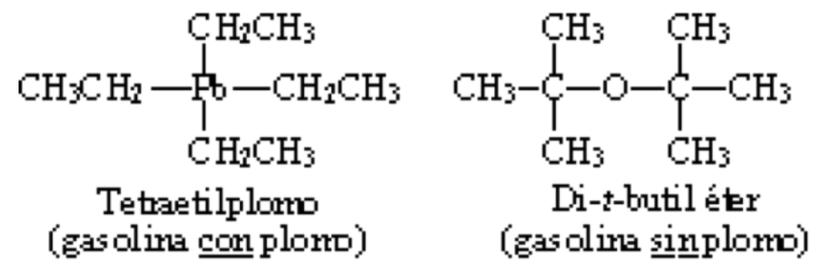
Benceno 106

El proceso tiene lugar a 500°C y 20 atm con un catalizador de platino finamente dividido sobre óxido de aluminio

Índice de octano para gasolinas



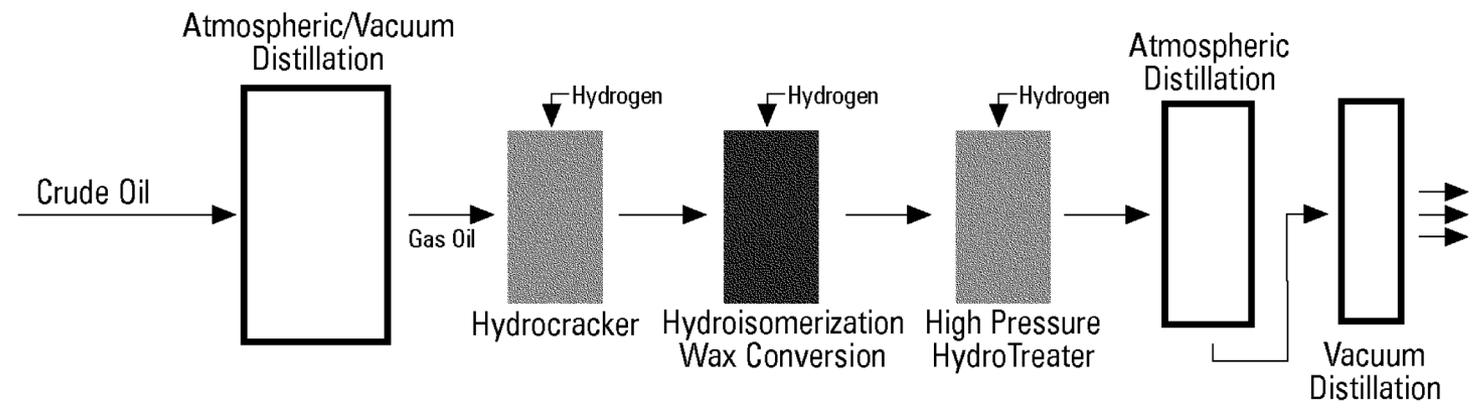
Aditivos



El índice de octano marca la capacidad de autoignición de la gasolina bajo presión. Cuanto mayor índice más difícil es la autoignición

Puede subirse el octanaje de una mezcla de alcanos mediante el uso de aditivos que impidan su autoignición prematura en el ciclo de explosión de un motor

Hydroisomerisation/hydrocracking process



Fracciones Gaseosas

Metano
Etano
Propano
Butano
Etileno
Propileno
Butilenos
Butadieno

Petróleo bruto Gas natural

Fracciones Líquidas y Sólidas

Benceno
Tolueno
Xileno
Gasolina ligera
Fracciones aromáticas pesadas
Parafinas

Productos de transformación

Acetileno
Acetaldehído
Acetona
Acrilonitrilo
Alcohol butílico
Alcohol etílico
Alcohol isopropílico
Alcohol metílico
Alcoholes de síntesis
Cloruro de vinilo
Dicloroetano
Etilenglicol
Etilbenceno
Estireno
Fenol
Formaldehído
Glicerol
Isopreno
Óxido de etileno
Propileno-glicol
Tripropileno
Tetrapropileno

Aplicaciones

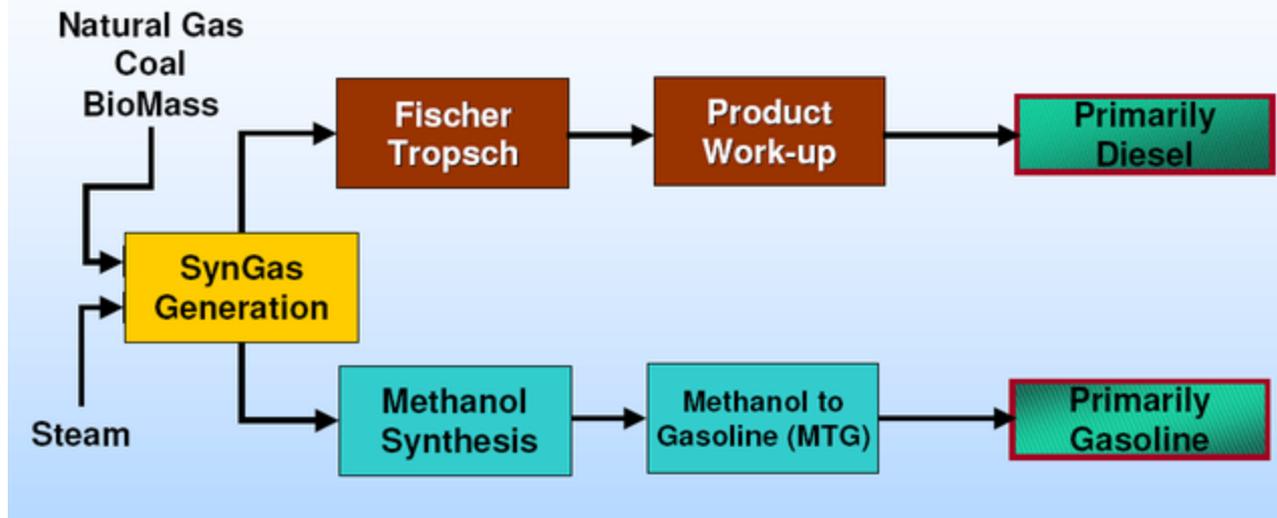
Abonos nitrogenados
Materias plásticas
Disolventes
Fibras sintéticas
Fibras artificiales
Anticongelantes
Cauchos sintéticos
Detergentes
Plastificantes
Insecticidas
Colorantes
Explosivos
Resinas

Productos de transformación

Etilbenceno
Estireno
Fenol
Ciclohexano
Ácido adípico
Dodecilbenceno
Ácidos sulfónicos
Toluendiisocianato
T.N.T.
Ortoxileno
Anhídrido ftálico
Xilenos
Ácido tereftálico
Ácido acético
Negro de carbono
Resinas de petróleo
Olefinas superiores
Aditivos
Parafinas cloradas

- MTH (Methanol-To-Hydrocarbons)
- MTG(Methanol-To-Gasoline)
- MTO(Methanol-To-Olefines)

Rutas obtención de "fuels" sintéticos: FT, MGT



-MTH(Methanol-To-Hydrocarbons)

