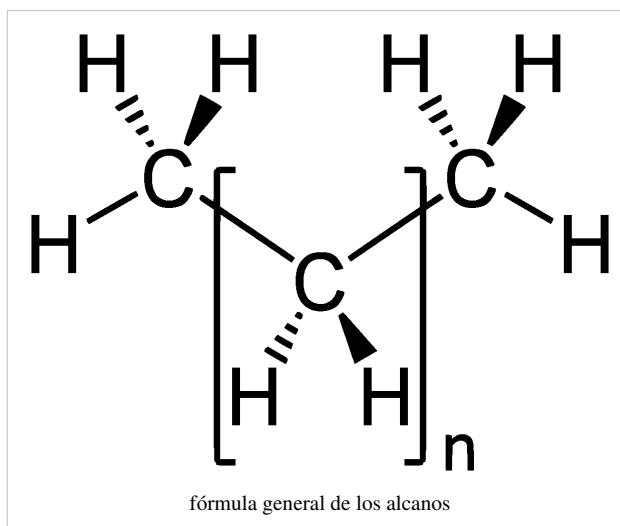
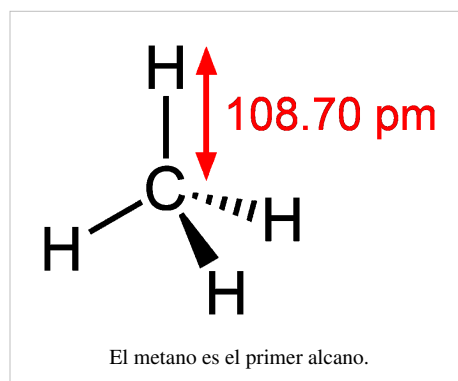


Alcano

Los **alcanos** son hidrocarburos, es decir, que tienen solo átomos de carbono e hidrógeno. La fórmula general para alcanos alifáticos (de cadena lineal) es $C_n H_{2n+2}$,^[1] y para cicloalcanos es $C_n H_{2n}$.^[2] También reciben el nombre de **hidrocarburos saturados**.

Los alcanos son compuestos formados solo por átomos de carbono e hidrógeno, no presentan funcionalización alguna, es decir, sin la presencia de grupos funcionales como el carbonilo (-CO), carboxilo (-COOH), amida (-CON=), etc. La relación C/H es de $C_n H_{2n+2}$ siendo n el número de átomos de carbono de la molécula, (como se verá después esto es válido para alcanos de cadena lineal y cadena ramificada pero no para alcanos cíclicos). Esto hace que su reactividad sea muy reducida en comparación con otros compuestos orgánicos, y es la causa de su nombre no sistemático: parafinas (del latín, poca afinidad). Todos los enlaces dentro de las moléculas de alcano son de tipo simple o sigma, es decir, covalentes por compartición de un par de electrones en un orbital s, por lo cual la estructura de un alcano sería de la forma:



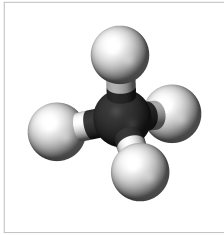
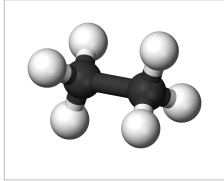
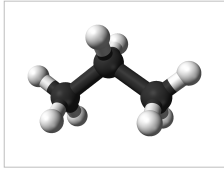
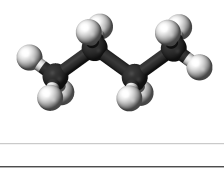
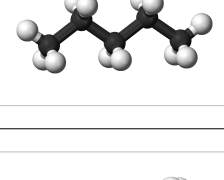
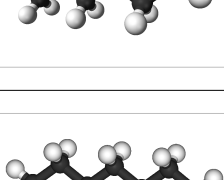
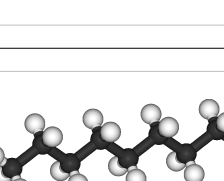

donde cada línea representa un enlace covalente. El alcano más sencillo es el metano con un solo átomo de carbono. Otros alcanos conocidos son el etano, propano y el butano con dos, tres y cuatro átomos de carbono respectivamente. A partir de cinco carbonos, los nombres se derivan de numerales griegos: pentano, hexano, heptano...

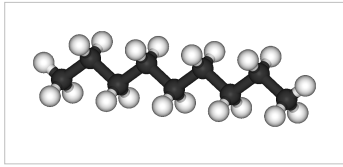
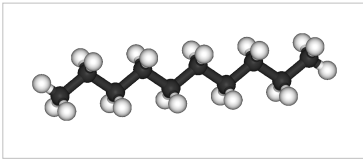
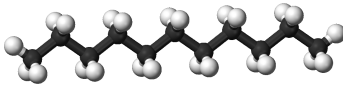
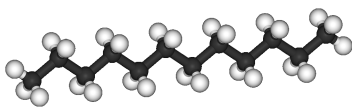
Nomenclatura

La nomenclatura IUPAC (forma sistemática de denominar a los compuestos) para los alcanos es el punto de partida para todo el sistema de nomenclatura. Se basa en identificar a las cadenas hidrocarbonadas. Las cadenas de hidrocarburos saturados lineales son nombradas sistemáticamente con un prefijo numérico griego que denota el número de átomos de carbono, y el sufijo "-ano".

Los 4 primeros reciben los nombres de metano, etano, propano y butano.

Los alcanos se obtienen mayoritariamente del petróleo, ya sea directamente o mediante cracking o pirólisis, esto es, rotura térmica de moléculas mayores. Son los productos base para la obtención de otros compuestos orgánicos. Estos son algunos ejemplos de alcanos:

| C | Nombre | Fórmula | Modelo |
|---|-------------------|--------------------------------|--|
| 1 | Metano | CH ₄ |  |
| 2 | Etano | C ₂ H ₆ |  |
| 3 | Propano | C ₃ H ₈ |  |
| 4 | <i>n</i> -Butano | C ₄ H ₁₀ |  |
| 5 | <i>n</i> -Pentano | C ₅ H ₁₂ |  |
| 6 | <i>n</i> -Hexano | C ₆ H ₁₄ |  |
| 7 | <i>n</i> -Heptano | C ₇ H ₁₆ |  |
| 8 | <i>n</i> -Octano | C ₈ H ₁₈ |  |

| | | | |
|----|--------------------|----------------|--|
| 9 | <i>n</i> -Nonano | C_9H_{20} |  |
| 10 | <i>n</i> -Decano | $C_{10}H_{22}$ |  |
| 11 | <i>n</i> -Undecano | $C_{11}H_{24}$ |  |
| 12 | <i>n</i> -Dodecano | $C_{12}H_{26}$ |  |

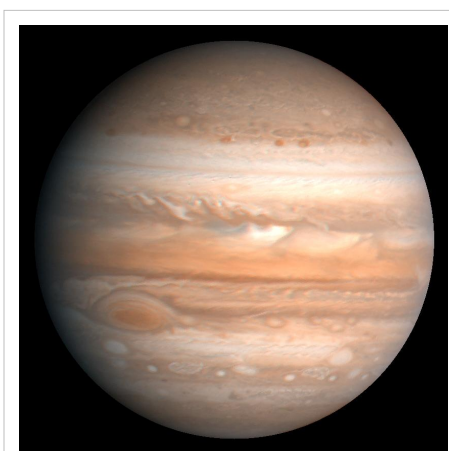
Cicloalcanos

Los alcanos cíclicos o cicloalcanos son, como su nombre indica hidrocarburos alcanos de cadena cíclica. En ellos la relación C/H es C_nH_{2n+2}). Sus características físicas son similares a las de los alcanos no cíclicos, pero sus características químicas difieren sensiblemente, especialmente aquellos de cadena más corta, de estos siendo más similares a las de los alquinos.

Abundancia

Abundancia de los alcanos en el universo

Los alcanos son una parte importante de la atmósfera de los planetas gaseosos exteriores, como Júpiter (0,1% metano, 0,0002% etano), Saturno (0,2% metano, 0,0005% etano), Urano (1,99% metano, 0,00025% etano) y Neptuno (1,5% metano, 1,5ppm etano). Titán, un satélite, de Saturno, fue estudiado por la sonda espacial *Huygens*, lo que indicó que la atmósfera de Titán llueve metano líquido a la superficie de la luna.^[3] También se observó en Titán un volcán que arrojaba metano, y se cree que este volcanismo es una fuente significativa de metano en la atmósfera. También parece ser que hay lagos de metano/etano cerca a las regiones polares nórdicas de Titán, como lo descubrió el sistema de imágenes por radar de la sonda Cassini. También se ha detectado metano y etano en la cola del cometa Hyakutake. El análisis químico mostró que la abundancia del etano y el metano son aproximadamente iguales, lo que se cree que implica que



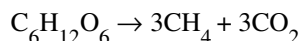
El metano y el etano constituyen una parte importante en la composición de la atmósfera de Júpiter.

los hielos formados en el espacio interestelar, lejos del sol, podrían haberse evaporado en forma desigual debido a la diferente volatilidad de estas moléculas.^[4] También se ha detectado alcanos en meteoritos tales como las condritas carbonáceas.

Abundancia de los alcanos en la Tierra

En la atmósfera hay trazas de gas metano (0,0001%), producido principalmente por organismos como Archaea, que se encuentra, por ejemplo, en el estómago de las vacas.

La fuente comercial más importante para los alcanos es el gas natural y el petróleo.^[5] El gas natural contiene principalmente metano y etano, pero también algo de propano y butano: el petróleo es una mezcla de alcanos líquidos y otros hidrocarburos. Estos hidrocarburos se formaron cuando los animales marinos y plantas (zooplancton y fitoplancton) muertos y hundidos en el fondo de los mares antiguos y cubiertos con sedimentos en un medio wikt:anóxico y cubiertos por varios millones de años a alta temperatura y presión hasta su forma actual. El gas natural, por ejemplo, se puede obtener de la reacción siguiente:



Estos hidrocarburos fueron absorbidos en rocas porosas, y se localizaron en una cápsula impermeable de roca y ahí quedaron atrapados. A diferencia del metano, que se reforma en grandes cantidades, los alcanos superiores (alcanos con 9 átomos de carbono o más) raras veces se producen en cantidades grandes en la naturaleza. Estos depósitos, por ejemplo, campos de petróleo, se han formado durante millones de años y una vez exhaustos no pueden ser reemplazados rápidamente. El agotamiento de estos hidrocarburos es la base para lo que se conoce como crisis energética.

Los alcanos sólidos se conocen como alquitrán y se forman cuando los alcanos más volátiles, como los gases y el aceite, se evaporan de los depósitos de hidrocarburos. Uno de los depósitos más grandes de alcanos sólidos es en el lago de asfalto conocido como el lago Pitch en Trinidad y Tobago.

El metano también está presente en el denominado biogás, producido por los animales y materia en descomposición, que es una posible fuente renovable de energía.

Los alcanos tienen solubilidad baja en agua; sin embargo, a altas presiones y temperaturas bajas (tal como en el fondo de los océanos), el metano puede co-cristalizar con el agua para formar un hidrato de metano sólido. Aunque éste no puede ser explotado comercialmente ahora, la cantidad de energía combustible de los campos de hidrato de metano conocidos excede al contenido de energía de todos los depósitos de gas natural y petróleo juntos; el metano extraído del clatrato de metano es entonces considerado un candidato para combustibles futuros.



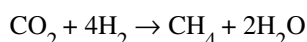
Extracción de petróleo, que contiene muchos hidrocarburos diferentes, incluyendo alcanos.

Abundancia biológica

Aunque los alcanos están presentes en la naturaleza de distintas formas, no están catalogados biológicamente como materiales esenciales. Hay cicloalcanos de tamaño de anillo entre 14 y 18 átomos de carbono en el musk, extraído de ciervos de la familia Moschidae. Toda la información adicional se refiere a los alcanos acíclicos.

Bacteria y archaea

Ciertos tipos de bacteria pueden metabolizar a los alcanos: prefieren las cadenas de carbono de longitud par pues son más fáciles de degradar que las cadenas de longitud impar. Por otro lado, ciertas archaea, los metanógenos, produce cantidades grandes de metano como producto del metabolismo del dióxido de carbono y otros compuestos orgánicos oxidados. La energía se libera por la oxidación del hidrógeno:



Los metanógenos también son los productores del gas de los pantanos en humedales, y liberan alrededor de dos mil millones de toneladas de metano por año—el contenido atmosférico de este gas es producido casi exclusivamente por ellos. La producción de metano del ganado y otros herbívoros, que pueden liberar hasta 150 litros por día, y de las termitas también se debe a los metanógenos. También producen los alcanos más simples en el intestino de los humanos. Por tanto, las archaea metanogénicas están en el extremo del ciclo del carbono, con el carbono siendo liberado en la atmósfera después de haber sido fijado por la fotosíntesis. Es posible que nuestros actuales depósitos de gas natural se hayan formado en forma similar.



Los organismos Archaea metanogénica en el estómago de esta vaca son responsables de algo del metano en la atmósfera de la Tierra.

Hongos y plantas

Los alcanos también juegan un rol, si bien es cierto menor, en la biología de los tres grupos de organismos eucariotas: hongos, plantas y animales. Algunas levaduras especializadas, como *Candida tropicalis*, *Pichia* sp., *Rhodotorula* sp., pueden usar alcanos como una fuente de carbono o energía. El hongo *Amorphotheca resinae* prefiere los alcanos de cadena larga en las gasolinas de aviación, y puede causar serios problemas para los aviones en las regiones tropicales. En las plantas, se encuentran alcanos sólidos de cadena larga; forman una capa firme de cera, la cutícula, sobre las áreas de las plantas expuestas al aire. Ésta protege a la planta de la pérdida de agua, a la vez que evita



El agua forma gotas sobre la película delgada de cera de alcanos en la cáscara de la manzana.

el leaching de minerales importantes por la lluvia. También es una protección contra las bacterias, hongos, e insectos dañinos— estos últimos se hunden con sus patas en la sustancia cerosa suave, y tienen dificultad para moverse. La capa brillante sobre las frutas, tales como en las manzanas, está formada por alcanos de cadena larga. Las cadenas de carbono tienen generalmente entre veinte y treinta átomos de carbono de longitud, y las plantas las producen a partir de los ácidos grasos. La composición exacta de la película de cera no solo depende de la especie, sino que cambia con la estación y factores ambientales como las condiciones de iluminación, temperatura o humedad.

Animales

Los alcanos se encuentran en productos animales, aunque son menos importantes que los hidrocarburos insaturados. Un ejemplo es el aceite de hígado de tiburón, que es aproximadamente 14% pristano (2,6,10,14-tetrametilpentadecano, $\text{C}_{19}\text{H}_{40}$). Su abundancia es más significativa en las feromonas, materiales que actúan como mensajeros químicos, en los cuales se fundamenta casi toda la comunicación entre insectos. En algunos tipos, como el escarabajo *Xylotrechus colonus*, principalmente el pentacosano ($\text{C}_{25}\text{H}_{52}$), 3-metilpentaicosano ($\text{C}_{26}\text{H}_{54}$) y 9-metilpentaicosano ($\text{C}_{26}\text{H}_{54}$), se transfieren por contacto corporal. Con otras, como la mosca tsetse

Glossina morsitans morsitans, la feromona contiene los cuatro alcanos 2-metilheptadecano ($C_{18}H_{38}$), 17,21-dimetilheptatriacontano ($C_{39}H_{80}$), 15,19-dimetilheptatriacontano ($C_{39}H_{80}$) y 15,19,23-trimetilheptatriacontano ($C_{40}H_{82}$), y actúa mediante el olfato en distancias grandes, una característica muy útil para el control de plagas.

Relaciones ecológicas

Un ejemplo, en el que tanto los alcanos de plantas y animales juegan un rol, es la relación ecológica entre la abeja *Andrena nigroaenea* y la orquídea *Ophrys sphegodes*; la última depende para su polinización de la primera. Las abejas *Andrena nigroaenea* usan feromonas para identificar a una compañera; en el caso de *A. nigroaenea*, las hembras emiten una mezcla de tricosano ($C_{23}H_{48}$), pentacosano ($C_{25}H_{52}$) y heptacosano ($C_{27}H_{56}$) en la proporción 3:3:1, y los machos son atraídos específicamente por este olor. La orquídea toma ventaja de este arreglo de apareamiento para hacer que las abejas macho recolecten y diseminen su polen; no solo sus flores se parecen a dicha especie de abejas, sino que también producen grandes cantidades de los tres alcanos en la misma proporción que las abejas *A. nigroaenea* hembra. Como resultado, numerosos machos son atraídos a las flores e intentan copular con su compañera imaginaria; aunque este comportamiento no se corona con el éxito para la abeja, permite a la orquídea transferir su polen, que se dispersará con la partida del macho frustrado a otras florales.



Ophrys sphegodes.

Producción

Refinado del petróleo

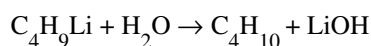
La fuente más importante de alcanos es el gas natural y el petróleo crudo.^[5] Los alcanos son separados en una refinería de petróleo por destilación fraccionada y procesados en muchos productos diferentes.

Fischer-Tropsch

El proceso Fischer-Tropsch es un método para sintetizar hidrocarburos líquidos, incluyendo alcanos, a partir de monóxido de carbono e hidrógeno. Este método es usado para producir sustitutos para los destilados de petróleo.

Preparación en el laboratorio

Generalmente hay poca necesidad de sintetizar alcanos en el laboratorio, dado que suelen estar disponibles comercialmente. También debido al hecho de que los alcanos son, generalmente, poco reactivos química y biológicamente, y no sufren interconversiones *limpias* de grupos funcionales. Cuando se producen alcanos en el laboratorio, suele ser un subproducto de una reacción. Por ejemplo, el uso de N-butil-litio como una base produce el ácido conjugado, n-butano como subproducto:



Sin embargo, a veces puede ser deseable convertir una porción de una molécula en una estructura funcionalmente alcánica (grupo alquilo) usando un método como el de arriba o métodos similares. Por ejemplo, un grupo etilo es un

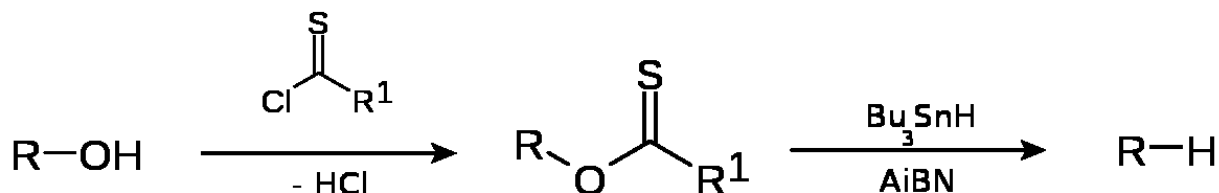


Una refinería de petróleo en Martinez, California.

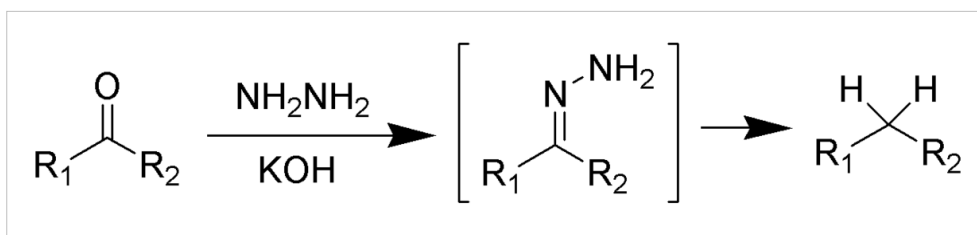
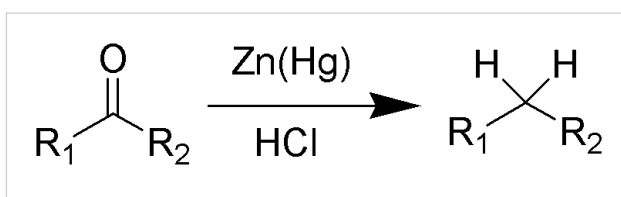
grupo alquilo; cuando está unido a un grupo hidroxilo, constituye el etanol, que no es un alcano. Para convertirlo en alcano, uno de los métodos más conocidos es la hidrogenación de alquenos o alquinos.



Los alcanos o los grupos alquilo pueden ser preparados directamente a partir de haloalcanos en la reacción de Corey-House-Posner-Whitesides. La reacción de Barton-McCombie^{[6][7]} elimina el grupo hidroxilo de los alcoholes, por ejemplo.



y la reducción de Clemmensen^{[8][9][10][11]} o la reducción de Wolff-Kishner eliminan los grupos carbonilo de los aldehídos y cetonas para formar alcanos o compuestos de sustituidos de alquilo:



Otros métodos para obtener alcanos son la reacción de Wurtz y la electrólisis de Kolbe.

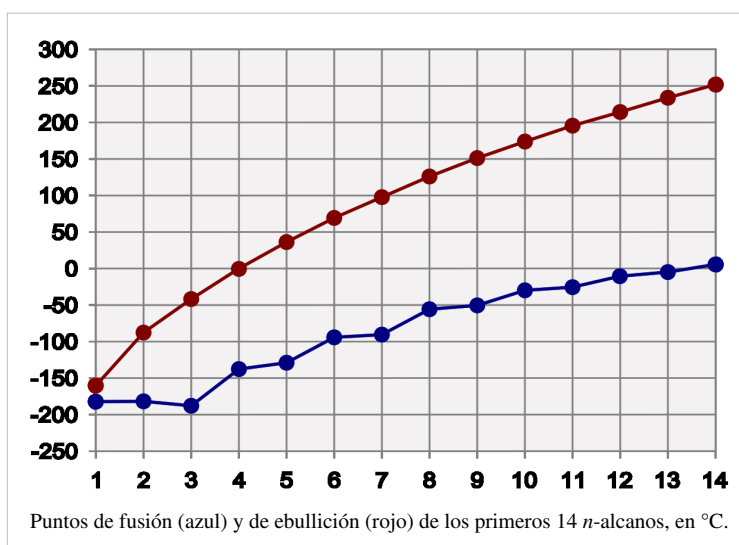
Propiedades físicas

Punto de ebullición

Los alcanos experimentan fuerzas intermoleculares de van der Waals y al presentarse mayores fuerzas de este tipo aumenta el punto de ebullición, además los alcanos se caracterizan por tener enlaces simples.^[5]

Hay dos agentes determinantes de la magnitud de las fuerzas de van der Waals:

- el número de electrones que rodean a la molécula, que se incrementa con la masa molecular del alcano
- el área superficial de la molécula



Bajo condiciones estándar, los alcanos desde el CH_4 hasta el C_4H_{10} son gases; desde el C_5H_{12} hasta $\text{C}_{17}\text{H}_{36}$ son líquidos; y los posteriores a $\text{C}_{18}\text{H}_{38}$ son sólidos. Como el punto de ebullición de los alcanos está determinado principalmente por el peso, no debería sorprender que los puntos de ebullición tengan una relación casi lineal con la masa molecular de la molécula. Como regla rápida, el punto de ebullición se incrementa entre 20 y 30 °C por cada átomo de carbono agregado a la cadena; esta regla se aplica a otras series homólogas.^[5]

Un alcano de cadena lineal tendrá un mayor punto de ebullición que un alcano de cadena ramificada, debido a la mayor área de la superficie de contacto, con lo que hay mayores fuerzas de van der Waals, entre moléculas adyacentes. Por ejemplo, compárese el isobutano y el n-butano, que hierven a -12 y 0 °C, y el 2,2-dimetilbutano y 2,3-dimetilbutano que hierven a 50 y 58 °C, respectivamente.^[5] En el último caso, dos moléculas de 2,3-dimetilbutano pueden "encajar" mutuamente mejor que las moléculas de 2,2-dimetilbutano entre sí, con lo que hay mayores fuerzas de van der Waals.

Por otra parte, los cicloalcanos tienden a tener mayores puntos de ebullición que sus contrapartes lineales, debido a las conformaciones fijas de las moléculas, que proporcionan planos para el contacto intermolecular.^[cita requerida]

Punto de fusión

El punto de fusión de los alcanos sigue una tendencia similar al punto de ebullición por la misma razón que se explicó anteriormente. Esto es, (si todas las demás características se mantienen iguales), a molécula más grande corresponde mayor punto de fusión. Hay una diferencia significativa entre los puntos de fusión y los puntos de ebullición: los sólidos tienen una estructura más rígida y fija que los líquidos. Esta estructura rígida requiere energía para poder romperse durante la fusión. Entonces, las estructuras sólidas mejor construidas requerirán mayor energía para la fusión. Para los alcanos, esto puede verse en el gráfico anterior. Los alcanos de longitud impar tienen puntos de fusión ligeramente menores que los esperados, comparados con los alcanos de longitud par. Esto es debido a que los alcanos de longitud par se empaquetan bien en la fase sólida, formando una estructura bien organizada, que requiere mayor energía para romperse. Los alcanos de longitud impar se empaquetan con menor eficiencia, con lo que el empaquetamiento más desordenado requiere menos energía para romperse.^[12]

Los puntos de fusión de los alcanos de cadena ramificada pueden ser mayores o menores que la de los alquenos

Conductividad

Los alcanos son malos conductores de la electricidad y no se polarizan sustancialmente por un campo eléctrico.

Solubilidad en agua

No forman enlaces de hidrógeno y son insolubles en solventes polares como el agua. Puesto que los enlaces de hidrógeno entre las moléculas individuales de agua están apartados de una molécula de alcano, la coexistencia de un alcano y agua conduce a un incremento en el orden molecular (reducción de entropía). Como no hay enlaces significativos entre las moléculas de agua y las moléculas de alcano, la segunda ley de la termodinámica sugiere que esta reducción en la entropía se minimizaría al minimizar el contacto entre el alcano y el agua: se dice que los alcanos son hidrofóbicos (repelen el agua).

Solubilidad en otros solventes

Su solubilidad en solventes no polares es relativamente buena, una propiedad que se denomina lipofilidad. Por ejemplo, los diferentes alcanos son miscibles entre sí en todas las demás proporciones.

Densidad

La densidad de los alcanos suele aumentar conforme aumenta el número de átomos de carbono, pero permanece inferior a la del agua. En consecuencia, los alcanos forman la capa superior en una mezcla de alcano-agua.

Geometría molecular

La estructura molecular de los alcanos afecta directamente a sus características físicas y químicas. Se deriva de la configuración electrónica del carbono, que tiene cuatro electrones de valencia. Los átomos de carbono en los alcanos siempre tienen hibridación sp^3 , lo que quiere decir que los electrones de valencia están en cuatro orbitales equivalentes, derivados de la combinación del orbital 2s y los orbitales 2p. Estos orbitales, que tienen energías idénticas, están orientados espacialmente en la forma de un tetraedro, con un ángulo de $\arccos(-1/3) \approx 109.47^\circ$ entre ellos.

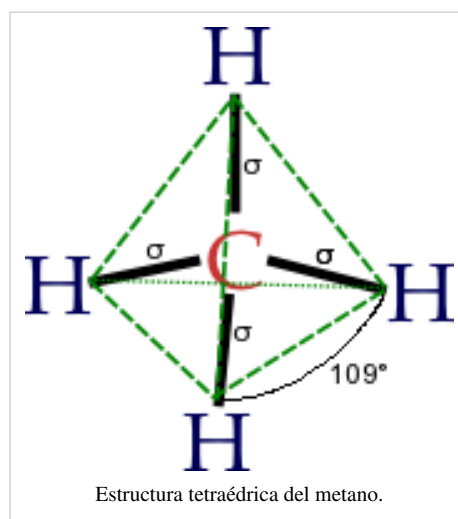
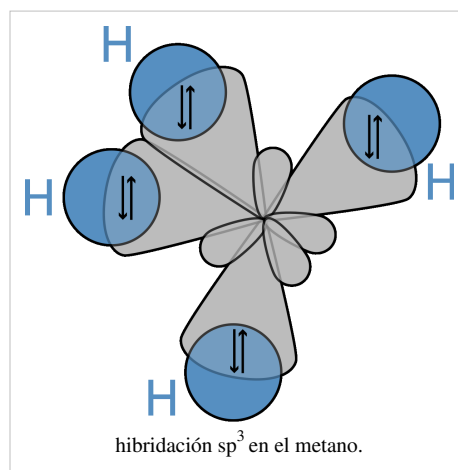
Longitudes de enlace y ángulos de enlace

Una molécula de alcano tiene solo enlaces simples C – H y C – C. Los primeros resultan del traslape de un orbital sp^3 del átomo de carbono con el orbital 1s de un átomo de hidrógeno; los últimos del traslape de dos orbitales sp^3 en átomos de carbono diferentes. La longitud de enlace es de $1,09 \times 10^{-10}$ m para un enlace C – H y $1,54 \times 10^{-10}$ m para un enlace C – C.

La disposición espacial de los enlaces es similar a la de cuatro orbitales sp^3 ; están dispuestos tetraédricamente, con un ángulo de $109,47^\circ$ entre ellos. La fórmula estructural que representa a los enlaces como si estuvieran en ángulos rectos unos con otros, aunque común y útil, no corresponde con la realidad.

Conformaciones

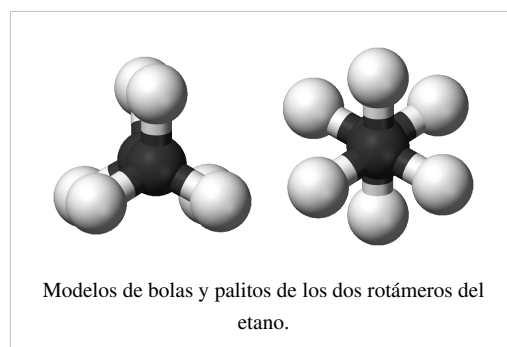
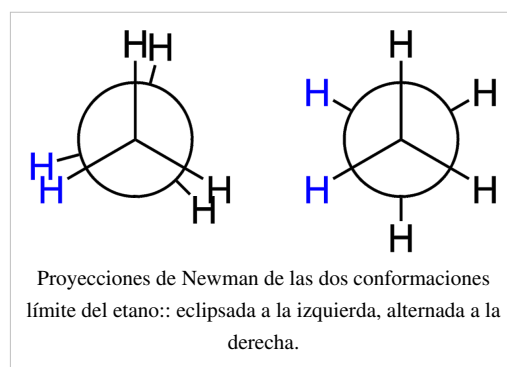
La fórmula estructural y los ángulos de enlace no suelen ser suficientes para describir la geometría de una molécula. Hay un grado de libertad para cada enlace carbono – carbono: el ángulo de torsión entre los átomos o grupos unidos a los átomos a cada extremo de un enlace. El arreglo espacial descrito por los ángulos de torsión de la molécula se conoce como su conformación.



El etano constituye el caso más simple para el estudio de las conformaciones de los alcanos, dado que solo hay un enlace C – C. Si se ve a lo largo del enlace C – C, se tendrá la denominada proyección de Newman. Los átomos de hidrógeno tanto en el átomo carbono anterior como en el átomo de carbono posterior tienen un ángulo de 120° entre ellos, resultante de la proyección de la base del tetraedro en una superficie plana. Sin embargo, el ángulo de torsión entre un átomo de hidrógeno dado del carbono anterior y un átomo de hidrógeno dado del carbono posterior puede variar libremente entre 0° y 360° . Esto es una consecuencia de la rotación libre alrededor del enlace carbono – carbono. A pesar de esta aparente libertad, solo hay dos conformaciones limitantes importantes: conformación eclipsada y conformación alternada.

Las dos conformaciones, también conocidas como rotámeros, difieren en energía: la conformación alternada es $12,6 \text{ kJ/mol}$ menor en energía (por tanto, más estable) que la conformación eclipsada (menos estable). La diferencia en energía entre las dos conformaciones, conocida como la energía torsional es baja comparada con la energía térmica de una molécula de etano a temperatura ambiente. Hay rotación constante alrededor del enlace C-C. El tiempo tomado para que una molécula de etano pase de la conformación alternada a la siguiente, equivalente a la rotación de un grupo CH_3 en 120° relativo a otro, es del orden de 10^{-11} segundos.

El caso de alcanos mayores es más complejo, pero se basa en los mismos principios, con la conformación antiperiplanar siendo más favorecida alrededor de cada enlace carbono-carbono. Por esta razón, los alcanos suelen mostrar una disposición en zigzag en los diagramas o en los modelos. La estructura real siempre diferirá en algo de estas formas idealizadas, debido a que las diferencias en energía entre las conformaciones son pequeñas comparadas con la energía térmica de las moléculas: las moléculas de alcano no tienen una forma estructural fija, aunque los modelos así lo sugieran.



| NOMBRE | Fórmula | Pto.Ebu/ $^\circ\text{C}$ | Pto. Fus./ $^\circ\text{C}$ | Densidad/ g cm^{-3} (20°C) |
|------------|------------------------------|---------------------------|-----------------------------|---|
| Metano | CH_4 | -162 | -183 | gas |
| Etano | C_2H_6 | -89 | -172 | gas |
| Propano | C_3H_8 | -42 | -188 | gas |
| Butano | C_4H_{10} | -0.5 | -135 | gas |
| Pentano | C_5H_{12} | 36 | -130 | 0.626 |
| Hexano | C_6H_{14} | 69 | -95 | 0.659 |
| Heptano | C_7H_{16} | 98 | -91 | 0.684 |
| Octano | C_8H_{18} | 126 | -57 | 0.703 |
| Nonano | C_9H_{20} | 151 | -54 | 0.718 |
| Decano | $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ | 174 | -30 | 0.730 |
| Undecano | $\text{C}_{11}\text{H}_{24}$ | 196 | -26 | 0.740 |
| Dodecano | $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$ | 216 | -10 | 0.749 |
| Triacotano | $\text{C}_{30}\text{H}_{62}$ | 343 | 37 | sólido |

Propiedades espectroscópicas

Prácticamente todos los compuestos orgánicos contienen enlaces carbono – carbono y carbono – hidrógeno, con lo que muestran algunas características de los alcanos en sus espectros. Los alcanos se distinguen por no tener otros grupos y, por tanto, por la "ausencia" de otras características espectroscópicas.

Espectroscopía NMR

La resonancia del protón de los alcanos suele encontrarse en $\delta_{\text{H}} = 0.5 - 1.5$. La resonancia del carbono-13 depende del número de átomos de hidrógeno unidos al carbono: $\delta_{\text{C}} = 8 - 30$ (primario, metilo, $-\text{CH}_3$), $15 - 55$ (secundario, metileno, $-\text{CH}_2-$), $20 - 60$ (terciario, metino, C-H) y cuaternario. La resonancia de carbono-13 de los átomos de carbono cuaternarios es característicamente débil, debido a la falta de efecto nuclear Overhauser y el largo tiempo de relajación, y puede faltar en muestras débiles, o en muestras que no han sido corridas un tiempo lo suficientemente largo.

Espectrometría de masas

Los alcanos tienen una alta energía de ionización, y el ion molecular es generalmente débil. El patrón de fragmentación puede ser difícil de interpretar, pero, en el caso de los alcanos de cadena ramificada, la cadena carbonada se rompe preferentemente en los átomos de carbono terciarios y cuaternarios, debido a la relativa estabilidad de los radicales libres resultantes. El fragmento resultante de la pérdida de solo un grupo metilo (M-15) suele estar ausente, y otros fragmentos suelen estar espaciados a intervalos de catorce unidades de masa, correspondiendo a la pérdida secuencial de grupos CH_2 .

Propiedades químicas

En general, los alcanos muestran una reactividad relativamente baja, porque sus enlaces de carbono son relativamente estables y no pueden ser fácilmente rotos. A diferencia de muchos otros compuestos orgánicos, no tienen grupo funcional.

Solo reaccionan muy pobremente con sustancias iónicas o polares. La constante de acidez para los alcanos tiene valores inferiores a 60, en consecuencia son prácticamente inertes a los ácidos y bases. Su inercia es la fuente del término *parafinas* (que significa "falta de afinidad"). En el petróleo crudo, las moléculas de alcanos permanecen químicamente sin cambios por millones de años.

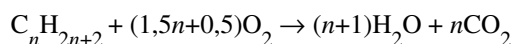
Sin embargo, es posible reacciones redox de los alcanos, en particular con el oxígeno y los halógenos, puesto que los átomos de carbono están en una condición fuertemente reducida; en el caso del metano, se alcanza el menor estado de oxidación posible para el carbono (-4). La reacción con el oxígeno conduce a la combustión sin humo; con los halógenos, a la reacción de sustitución. Además, los alcanos interactúan con, y se unen a, ciertos complejos de metales de transición (ver: activación del enlace carbono-hidrógeno).

Los radicales libres, moléculas con un número impar de electrones, juegan un papel importante en la mayoría de reacciones de los alcanos, tales como el cracking y el reformado, donde los alcanos de cadena larga se convierten en alcanos de cadena corta, y los alcanos de cadena lineal en los isómeros ramificados, respectivamente.

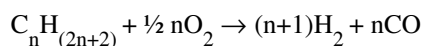
En los alcanos altamente ramificados, el ángulo de enlace puede diferir significativamente del valor óptimo ($109,47^\circ$) para permitir a los diferentes grupos suficiente espacio. Esto origina una tensión en la molécula conocida como impedimento estérico, y puede aumentar sustancialmente la reactividad.

Reacciones con oxígeno

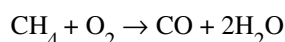
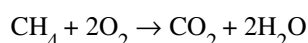
Todos los alcanos reaccionan con oxígeno en una reacción de combustión, si bien se torna más difícil de inflamar al aumentar el número de átomos de carbono. La ecuación general para la combustión completa es:



En ausencia de oxígeno suficiente, puede formarse monóxido de carbono o inclusive negro de humo, como se muestra a continuación:



por ejemplo metano:



Ver tabla de calor de formación de alcanos para información detallada.

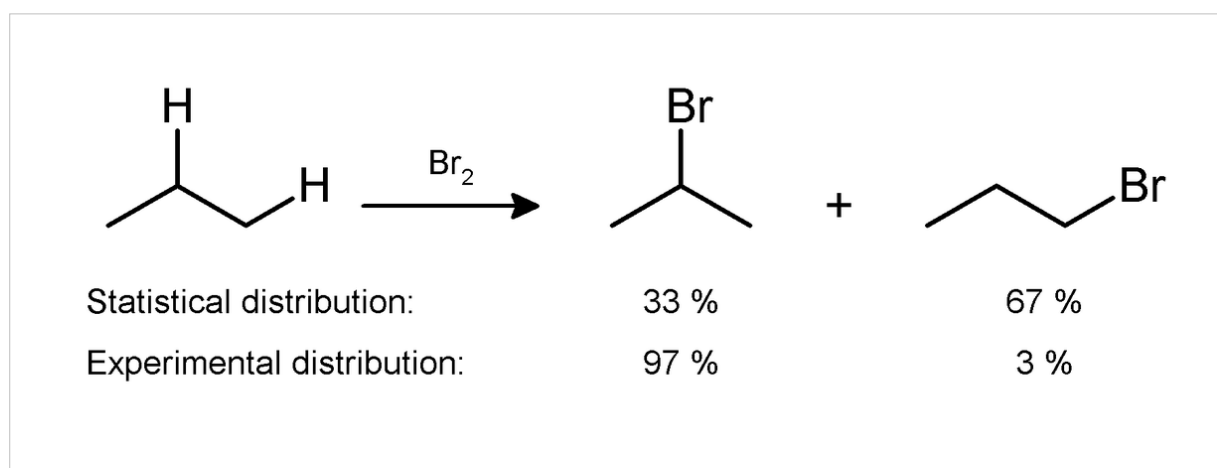
El cambio de entalpía estándar de combustión, $\Delta_c H^\circ$, para los alcanos se incrementa aproximadamente en 650 kJ/mol por cada grupo CH_2 en una serie homóloga. Los alcanos de cadena ramificada tienen menores valores de $\Delta_c H^\circ$ que los alcanos de cadena lineal del mismo número de átomos de carbono, por lo que pueden ser vistos como algo más estables.

Reacciones con halógenos

Los alcanos reaccionan con halógenos en la denominada reacción de *halogenación radicalaria*. Los átomos de hidrógeno del alcano son reemplazados progresivamente por átomos de halógeno. Los radicales libres son las especies que participan en la reacción, que generalmente conduce a una mezcla de productos. La reacción es altamente exotérmica, y puede resultar en una explosión.

Estas reacciones son una importante ruta industrial para los hidrocarburos halogenados.

Los experimentos han mostrado que toda halogenación produce una mezcla de todos los isómeros posibles, indicando que todos los átomos de hidrógeno son susceptibles de reaccionar. Sin embargo, la mezcla producida no es una mezcla estadística: los átomos de hidrógeno secundarios y terciarios son reemplazados preferentemente debido a la mayor estabilidad de los radicales secundarios y terciarios. Un ejemplo puede verse en la monobromación del propano.^[5]



Cracking

El cracking rompe moléculas grandes en unidades más pequeñas. Esta operación puede realizarse con un método térmico o un método catalítico. El proceso de cracking térmico sigue un mecanismo de reacción homolítico con formación de radicales libres. El proceso de cracking catalítico involucra la presencia de un catalizador ácido (generalmente ácidos sólidos como silica-alúmina y zeolitas), que promueven la heterólisis (ruptura asimétrica) de los enlaces, produciendo pares de iones de cargas opuestas, generalmente un carbocatión y el anión hidruro, que es muy inestable.

Los radicales libres de alquilo y los carbocationes son altamente inestables, y sufren procesos de reordenamiento de la cadena, y la escisión del enlace C-C en la posición beta, además de transferencias de hidrógeno o hidruro intramolecular y extramolecular. En ambos tipos de procesos, los reactivos intermediarios (radicales, iones) se regeneran permanentemente, por lo que proceden por un mecanismo de autopropagación en cadena. Eventualmente, la cadena de reacciones termina en una recombinación de iones o radicales.

Isomerización y reformado

La isomerización y reformado son procesos en los que los alcanos de cadena lineal son calentados en presencia de un catalizador de platino. En la isomerización, los alcanos se convierten en sus isómeros de cadena ramificada. En el reformado, los alcanos se convierten en sus formas cíclicas o en hidrocarburos aromáticos, liberando hidrógeno como subproducto. Ambos procesos elevan el índice de octano de la sustancia.

Otras reacciones

Los alcanos reaccionan con vapor en presencia de un catalizador de níquel para producir hidrógeno. Los alcanos pueden ser clorosulfonados y nitrados, aunque ambas reacciones requieren condiciones especiales. La fermentación de los alcanos a ácidos carboxílicos es de importancia técnica. En la reacción de Reed, el dióxido de azufre y cloro convierten a los hidrocarburos en cloruros de sulfonilo, en un proceso inducido por luz.

Aplicaciones

Las aplicaciones de los alcanos pueden ser determinadas bastante bien de acuerdo al número de átomos de carbono. Los cuatro primeros alcanos son usados principalmente para propósitos de calefacción y cocina, y en algunos países para generación de electricidad. El metano y el etano son los principales componentes del gas natural; pueden ser almacenados como gases bajo presión. Sin embargo, es más fácil transportarlos como líquidos: esto requiere tanto la compresión como el enfriamiento del gas.

El propano y el butano pueden ser líquidos a presiones moderadamente bajas y son conocidos como gases licuados del petróleo (GLP). Por ejemplo, el propano se usa en el quemador de gas propano, el butano en los encendedores descartables de cigarrillos. Estos dos alcanos son usados también como propelentes en pulverizadores. Desde el pentano hasta el octano, los alcanos son líquidos razonablemente volátiles. Se usan como combustibles en motores de combustión interna, puesto que pueden vaporizarse rápidamente al entrar en la cámara de combustión, sin formar gotas, que romperían la uniformidad de la combustión. Se prefieren los alcanos de cadena ramificada, puesto que son menos susceptibles a la ignición prematura, que causa el cascabeleo en los motores, que sus análogos de cadena lineal. Esta propensión a la ignición prematura es medida por el índice de octano del combustible, donde el 2,2,4-trimetilpentano (*isooctano*) tiene un valor arbitrario de 100, y heptano tiene un valor de cero. Además de su uso como combustibles, los alcanos medios son buenos solventes para las sustancias no polares.

Los alcanos a partir del hexadecano en adelante constituyen los componentes más importantes del aceite combustible y aceite lubricante. La función de los últimos es también actuar como agentes anticorrosivos, puesto que su naturaleza hidrofóbica implica que el agua no puede llegar a la superficie del metal. Muchos alcanos sólidos encuentran uso como cera de parafina, por ejemplo en vela. Ésta no debe confundirse con la verdadera cera, que

consiste principalmente de ésteres.

Los alcanos con una longitud de cadena de aproximadamente 35 o más átomos de carbono se encuentran en el betún, que se usa, por ejemplo, para asfaltar los caminos. Sin embargo, los alcanos superiores tienen poco valor, y se suelen romper en alcanos menores mediante cracking.

Algunos polímeros sintéticos tales como el polietileno y el polipropileno son alcanos con cadenas que contienen cientos de miles de átomos de carbono. Estos materiales se usan en innumerables aplicaciones, y se fabrican y usan millones de toneladas de estos materiales al año.


Riesgos

El metano es explosivo cuando está mezclado con aire (1 – 8% CH₄) y es un agente muy fuerte en el efecto invernadero. Otros alcanos menores también forman mezclas explosivas con el aire. Los alcanos líquidos ligeros son altamente inflamables, aunque este riesgo decrece con el aumento de la longitud de la cadena de carbono. El pentano, hexano, heptano y octano están clasificados como *peligrosos para el medio ambiente* y *nocivos*. El isómero de cadena lineal del hexano es una neurotoxina.

Referencias

- [1] (<http://books.google.es/books?id=Btuo9XPGrOUC&pg=PA302&dq=fórmula+general+para+alcanos+alifáticos&hl=es&sa=X&ei=grMOUKmcCcKphAee0oGQDA&ved=0CE8Q6AEwBA#v=onepage&q=fórmula+general+para+alcanos+alifáticos&f=false>) *Química: Teoría y Problemas*. Escrito por José Antonio García Pérez. pag 302. books.google.es
- [2] (<http://books.google.es/books?id=QPEOrValv98C&pg=PA131&dq=fórmula+general+para+cicloalcanos&hl=es&sa=X&ei=bLQOUNmXEck4hAeGnYHwAQ&ved=0CF0Q6AEwBw#v=onepage&q=fórmula+general+para+cicloalcanos&f=false>) *Química Orgánica*. Escrito por John McMurry. pag 131. books.google.es
- [3] Titan: Arizona in an Icebox? (http://www.planetary.org/news/2005/huygens_science-results_0121.html), Emily Lakdawalla, 2004-01-21, verified 2005-03-28
- [4] Mumma, M.J. (1996). «Detection of Abundant Ethane and Methane, Along with Carbon Monoxide and Water, in Comet C/1996 B2 Hyakutake: Evidence for Interstellar Origin». *Science* **272**: pp. 1310. doi: 10.1126/science.272.5266.1310 (<http://dx.doi.org/10.1126/science.272.5266.1310>). PMID 8650540 (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/8650540>).
- [5] R. T. Morrison, R. N. Boyd. *Organic Chemistry* (6th edición). New Jersey: Prentice Hall. ISBN 0-13-643669-2.
- [6] Barton, D. H. R.; McCombie, S. W. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1* **1975**, *16*, 1574-1585
- [7] Crich, D.; Quintero, L. *Chem. Rev.* **1989**, *89*, 1413-1432.
- [8] Martin, E. L. *Org. React.* **1942**, *1*, 155. (Review)
- [9] Buchanan, J. G. St. C.; Woodgate, P. D. *Quart. Rev.* **1969**, *23*, 522. (Review)
- [10] Vedejs, E. *Org. React.* **1975**, *22*, 401. (Review)
- [11] Yamamura, S.; Nishiyama, S. *Comp. Org. Syn.* **1991**, *8*, 309-313. (Review)
- [12] Boese R, Weiss HC, Blaser D (1999). «The melting point alternation in the short-chain n-alkanes: Single-crystal X-ray analyses of propane at 30 K and of n-butane to n-nonane at 90 K». *Angew Chemie Int Ed* **38**: pp. 988–992. doi: 10.1002/(SICI)1521-3773(19990401)38:7<988::AID-ANIE988>3.3.CO;2-S ([http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-3773\(19990401\)38:7<988::AID-ANIE988>3.3.CO;2-S](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1521-3773(19990401)38:7<988::AID-ANIE988>3.3.CO;2-S)).

Enlaces externos

-  Wikimedia Commons alberga contenido multimedia sobre **Alcano** Commons.
- Documento Sinorg UJI de Alcanos (<http://www.sinorg.uji.es/Docencia/QO/tema1QO.pdf>)

Fuentes y contribuyentes del artículo

Alcano *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?oldid=61993097> *Contribuyentes:* 4lex, A ver, Akhram, Alucard41, Andre Engels, Angel GN, Angie Nathaly, Angus, Apcpca, Armando-Martin, Arona, Açipni-Lovrij, Benjamin im, Bernardo gu ar, Beto29, BlackBeast, Bucephala, C'est moi, Camilo, Carturo222, Cdertgb, Chema123war, Cookie, Cratón, DARK.3, Dark Bane, David0811, Diegusjaimes, Dilectus, Duckofoz, El Moska, F.A.A, Fabrymu1024, Fcomax, GONZALO VALDIVIA, Gijzopium, Gmagno, Guidolucero, HUB, Helmy oved, Humberto, Ialad, Igna, Isha, Issamar, J.M.Domingo, JMPerez, Jjafjaf, Jkbw, Johncandle, Jorge c2010, Joseaperez, Junior m, JustinianoXII, KES47, Katherine Cisneros, KnightRider, Leonpolanco, Leyo, Lily2992, Macarrones, Matdrodes, Mephisto spa, Moriel, Mushii, Mutari, NILO ROBLES, Nanovapor9, Omegakent, Opinador, Ortisa, Osmar99, PACO, Pabloito, Pepe Trueno, PetrohsW, Poco a poco, Prometheus, Pólux, Raulshc, Renly, Resped, Richardsonwow, Rijgalindo, Roland1952, Rosarinagazo, Rosarino, Sabbut, Saul ip, Songoku92, Sporedit, Suchster1, Tano4595, VanKleinen, Villasephiroth, Vitamine, VpantojaM, Wady21, Xapa, Xatufan, Xexito, Xuankar, Yesydrodriguez, Youarebeautiful, Youssefsan, 393 ediciones anónimas

Fuentes de imagen, Licencias y contribuyentes

Archivo:Methane-CRC-MW-dimensions-2D.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Methane-CRC-MW-dimensions-2D.png> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Ben Mills

Archivo:Alkanes.svg *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Alkanes.svg> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Yikrazuul

Archivo:Methane-3D-balls.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Methane-3D-balls.png> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Benjah-bmm27

Archivo:Ethane-3D-balls.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Ethane-3D-balls.png> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Benjah-bmm27

Archivo:Propane-3D-balls-B.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Propane-3D-balls-B.png> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Ben Mills

Archivo:Butane-3D-balls.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Butane-3D-balls.png> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Ben Mills and Jynto

Archivo:Pentane-3D-balls.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Pentane-3D-balls.png> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Ben Mills and Jynto

Archivo:Hexane-3D-balls.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Hexane-3D-balls.png> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Ben Mills

Archivo:Heptane-3D-balls.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Heptane-3D-balls.png> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Benjah-bmm27, Dbc334

Archivo:Octane-3D-balls.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Octane-3D-balls.png> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Benjah-bmm27, Dbc334

Archivo:Nonane-3D-balls.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Nonane-3D-balls.png> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Benjah-bmm27, Dbc334, Edgar181

Archivo:Decane-3D-balls.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Decane-3D-balls.png> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Benjah-bmm27, Dbc334, Edgar181

Archivo:Undecane-3D-balls.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Undecane-3D-balls.png> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Ben Mills and Jynto

Archivo:Dodecane-3D-balls.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Dodecane-3D-balls.png> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Benjah-bmm27, Dbc334, Kw0

Archivo:Jupiter.jpg *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Jupiter.jpg> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* NASA/JPL/USGS

Archivo:Oil well.jpg *Fuente:* http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Oil_well.jpg *Licencia:* GNU Free Documentation License *Contribuyentes:* Original uploader was Fclceloguy at en.wikipedia

Archivo:Rotbuntes Rind.jpg *Fuente:* http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Rotbuntes_Rind.jpg *Licencia:* Creative Commons Attribution-Sharealike 2.5 *Contribuyentes:* Aka, Darkone, Kersti Nebelsiek, Rmhermen

Archivo:Fuji apple.jpg *Fuente:* http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Fuji_apple.jpg *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Scott Bauer, USDA ARS

Archivo:Ophrys sphegodes flower.jpg *Fuente:* http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Ophrys_sphgodes_flower.jpg *Licencia:* GNU Free Documentation License *Contribuyentes:* User:BerndH

Archivo:ShellMartinez-refi.jpg *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:ShellMartinez-refi.jpg> *Licencia:* Creative Commons ShareAlike 1.0 Generic *Contribuyentes:* User:Leonard G.

Archivo:Barton-McCombie Deoxygenation Scheme.svg *Fuente:* http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Barton-McCombie_Deoxygenation_Scheme.svg *Licencia:* Creative Commons Attribution 3.0 *Contribuyentes:* Roland Mattern

Archivo:Clemmensen Reduction Scheme.png *Fuente:* http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Clemmensen_Reduction_Scheme.png *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* User:Roland1952

Archivo:Wolff-Kishner Reduction Scheme.png *Fuente:* http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Wolff-Kishner_Reduction_Scheme.png *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Cwbn (commons), Florian.rubach, Hystrix, Leyo, Pavlo Chemist, ~K

Archivo:Alkanschmelzunsiedepunkt.svg *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Alkanschmelzunsiedepunkt.svg> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Original work:de:Bild:Alkanschmelzunsiedepunkt.png Derivative work: KES47 (talk)

Archivo:Ch4 hybridization.svg *Fuente:* http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Ch4_hybridization.svg *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Original uploader was K. Aainsqatsi at en.wikipedia (Original text : K. Aainsqatsi)

Archivo:Ch4-structure.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Ch4-structure.png> *Licencia:* GNU Free Documentation License *Contribuyentes:* Benjah-bmm27, Cwbn (commons), Dbc334, Maksim, Razorbliss, 1 ediciones anónimas

Archivo:Newman projection ethane.png *Fuente:* http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Newman_projection_ethane.png *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Aglarech at de.wikipedia; Leyo

Archivo:Ethane-rotamers-3D-balls.png *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Ethane-rotamers-3D-balls.png> *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Benjah-bmm27

Archivo:Monobromination of propane.png *Fuente:* http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Monobromination_of_propane.png *Licencia:* Public Domain *Contribuyentes:* Benjah-bmm27, Edgar181, Hystrix, Jynto, Rifleman 82

Archivo:Commons-logo.svg *Fuente:* <http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Archivo:Commons-logo.svg> *Licencia:* logo *Contribuyentes:* SVG version was created by User:Grunt and cleaned up by 3247, based on the earlier PNG version, created by Reidab.

Licencia