

## Tema 2. Alcanos y cicloalcanos, isomería conformacional y geométrica

**Existen tres clases principales de Hidrocarburos:**

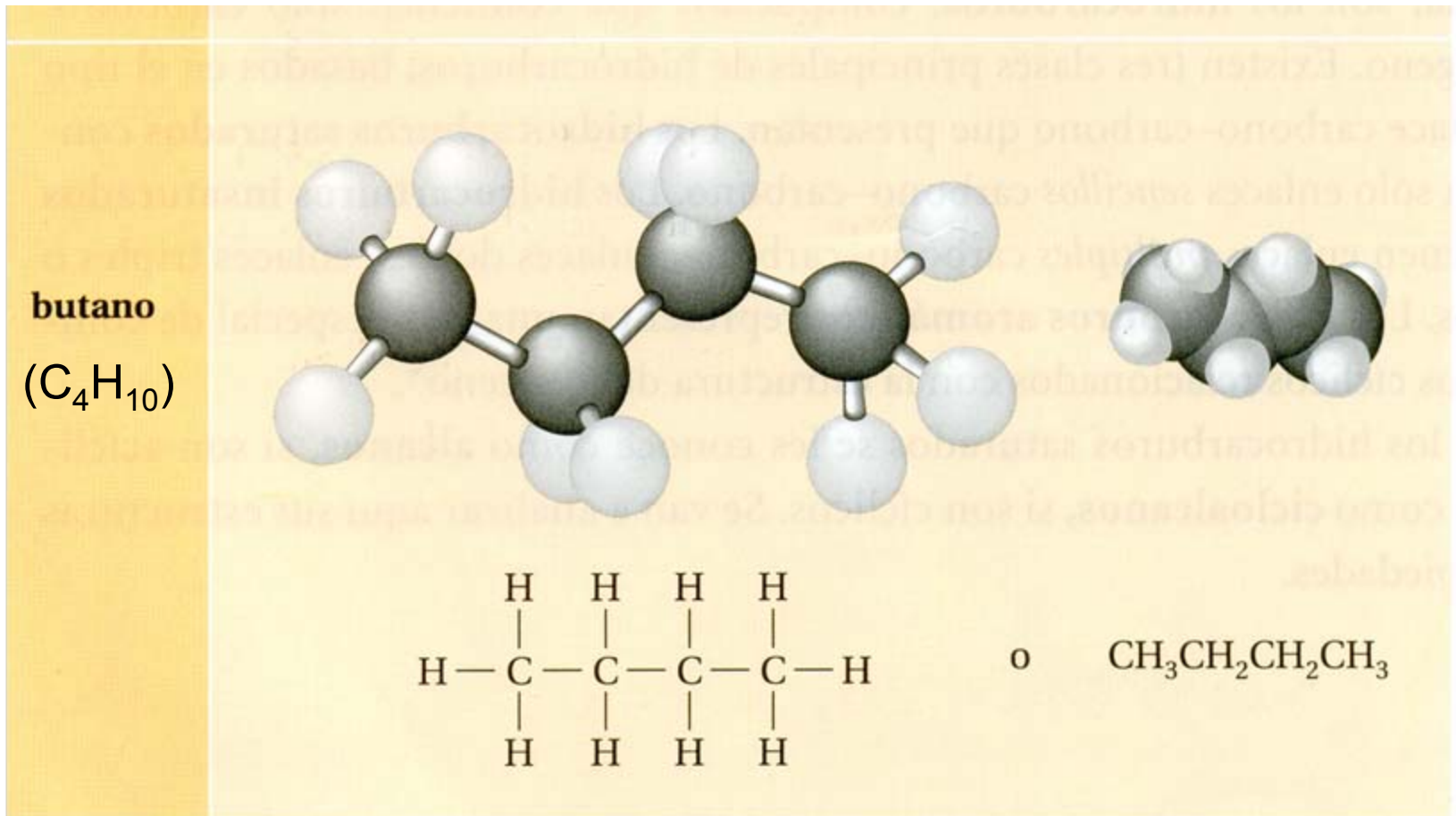
Hidrocarburos saturados (alcanos y cicloalcanos)

Hidrocarburos insaturados (alquenos y alquinos)

Hidrocarburos aromáticos (derivados del benceno)

# 2.1 Estructura de los alcanos

## fórmula molecular general ( $C_nH_{2n+2}$ )

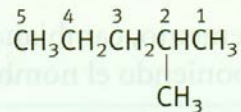


**PROBLEMA 2.1.**- ¿Cuáles de los siguientes compuestos son alcanos? a)  $C_7H_{18}$  b)  $C_7H_{16}$   
c)  $C_8H_{16}$  d)  $C_{27}H_{56}$ .



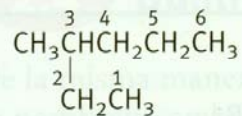
## 2.2 Nomenclatura (reglas de la IUPAC)

### EJEMPLOS DEL USO DE LAS REGLAS DE LA IUPAC



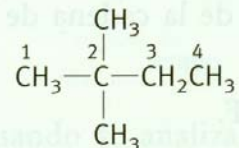
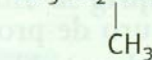
**2-metilpentano**  
(no 4-metilpentano)

La terminación *-ano* indica que todos los enlaces carbono-carbono son sencillos; *penta-* indica que la cadena más larga tiene cinco carbonos. Estos carbonos se numeran de derecha a izquierda, comenzando por el extremo más cercano a la ramificación.



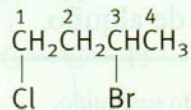
**3-metilhexano**  
(no 2-etilpentano  
o 4-metilhexano)

Se trata de una cadena carbonada saturada de seis carbonos, con un grupo metilo en el tercer carbono. Comúnmente la estructura se escribe como



**2,2-dimetilbutano**  
(no 2,2-metilbutano  
o 2-dimetilbutano)

Se debe numerar cada sustituyente; el prefijo *di-* indica que hay dos sustituyentes metilo.



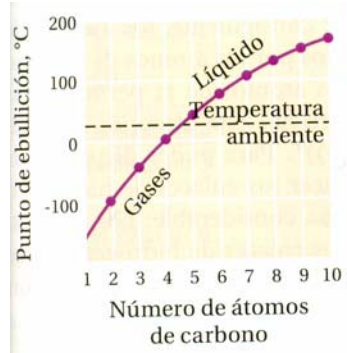
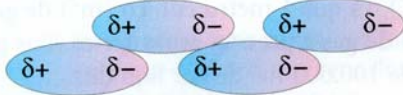
**3-bromo-1-clorobutano**  
(no 1-cloro-3-bromobutano  
o 2-bromo-4-clorobutano)

Primero, se numera la cadena de butano desde el extremo más cercano al primer sustituyente. A continuación se nombran los sustituyentes por orden alfabético, independientemente de su numeración.

# 2.3 Propiedades físicas

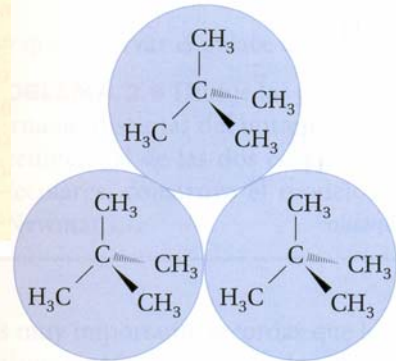
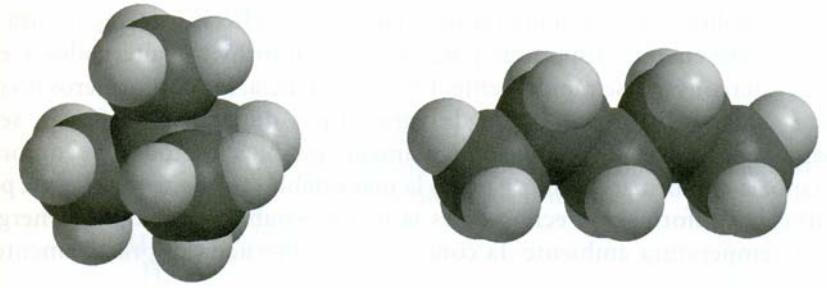
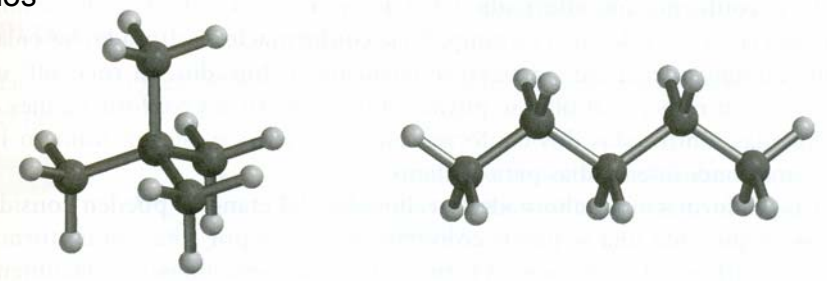
Los alcanos son insolubles en agua. Esto se debe a que las moléculas de agua son *polares*, mientras que los alcanos son *no polares* (todos los enlaces C-C y C-H son casi covalentes puros).

Los alcanos presentan puntos de ebullición menores que la mayoría de los compuestos orgánicos del mismo peso molecular. Esto se debe a que son moléculas no polares. Se encuentran en constante movimiento, y los electrones dentro de una molécula no polar pueden distribuirse desigualmente de manera temporal, creando una carga parcial positiva y otra negativa en cada extremo, en un momento dado. La molécula polarizada temporalmente induce en sus moléculas vecinas a su vez un dipolo temporal, y estas moléculas se atraen débilmente entre sí. Estas interacciones entre moléculas reciben el nombre de **atracciones de van der Waals**.

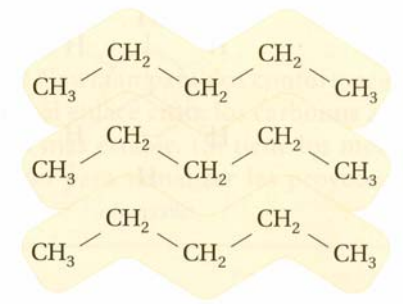


Nombre	Fórmula	Punto de ebullición, °C
pentano	<chem>CH3CH2CH2CH2CH3</chem>	36
2-metilbutano (isopentano)	<chem>CH3CH(CH3)CH2CH3</chem>	28
2,2-dimetilpropano (neopentano)	<chem>C(CH3)4</chem>	10

Como se muestra en la curva, los puntos de ebullición de los alcanos se elevan suavemente a medida que aumenta la longitud de la cadena carbonada. Sin embargo, en la tabla se puede observar, que una ramificación en la cadena al provocar una disminución de la superficie de contacto para la actuación de las atracciones de van der Waals, causa una disminución del p.eb.



2, 2-dimetilpropano  
p.e. 10°C  
(a)



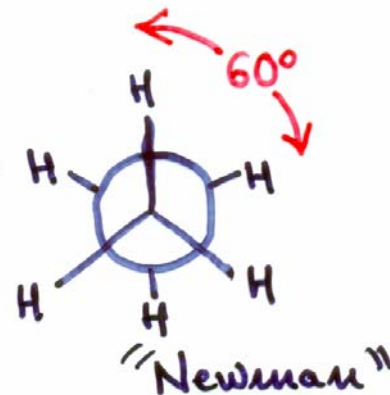
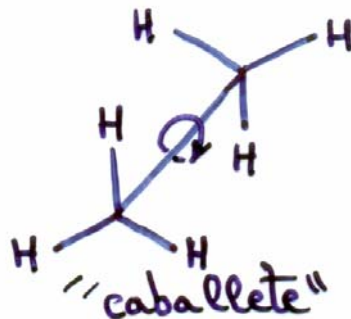
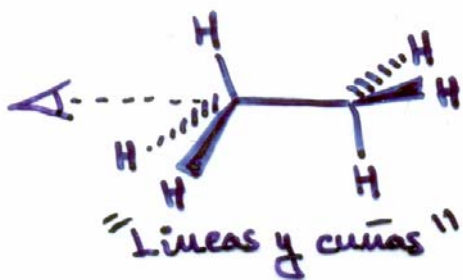
pentano  
p.e. 36°C  
(b)

## 2.4 Conformación de los alcanos

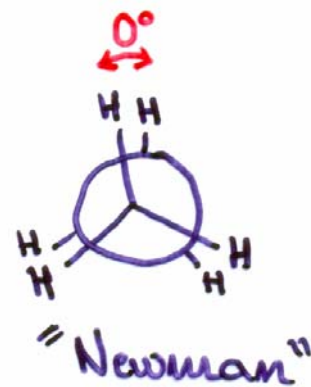
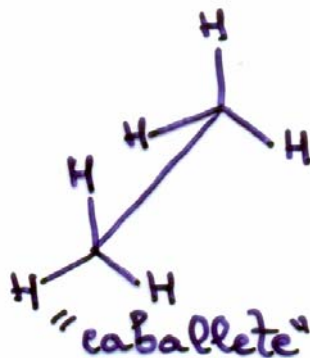
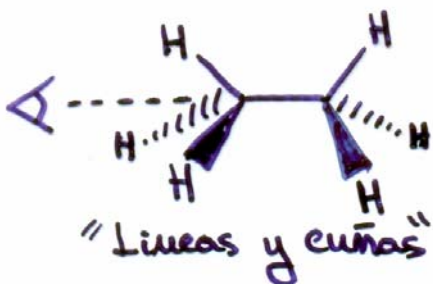
- La forma de las moléculas afecta a menudo a sus propiedades. Una molécula simple como el etano, por ejemplo, puede tener un número infinito de disposiciones, como consecuencia de la rotación sobre un átomo de carbono (y los hidrógenos unidos a él) con respecto a otro átomo de carbono. Estas disposiciones reciben el nombre de **conformaciones** o **confórmeros**. Los confórmeros son **estereoisómeros**, es decir, isómeros en los que los átomos se conectan en la misma secuencia, pero con diferente disposición espacial.

En la figura se muestran dos de las conformaciones posibles del etano; alternada y eclipsada. Se interconvierten fácilmente por una rotación de  $60^\circ$  en torno al enlace C-C, como se muestra por las flechas curvas. Las estructuras de la izquierda son estructuras de "líneas y cuñas", las cuales, al verlas como se muestran desde los ojos dibujados, se convierten en el dibujo de "caballete", o en la proyección de Newman de la derecha, al observar el enlace C-C en un mismo eje. En la proyección de Newman, el círculo representa dos átomos de carbono unidos. Los enlaces del carbono "delantero" llegan hasta el centro del círculo y los enlaces del carbono "trasero" llegan sólo hasta el borde del círculo.

## CONFORMACIONES del ETANO:



### ESCALONADA ó ALTERNADA



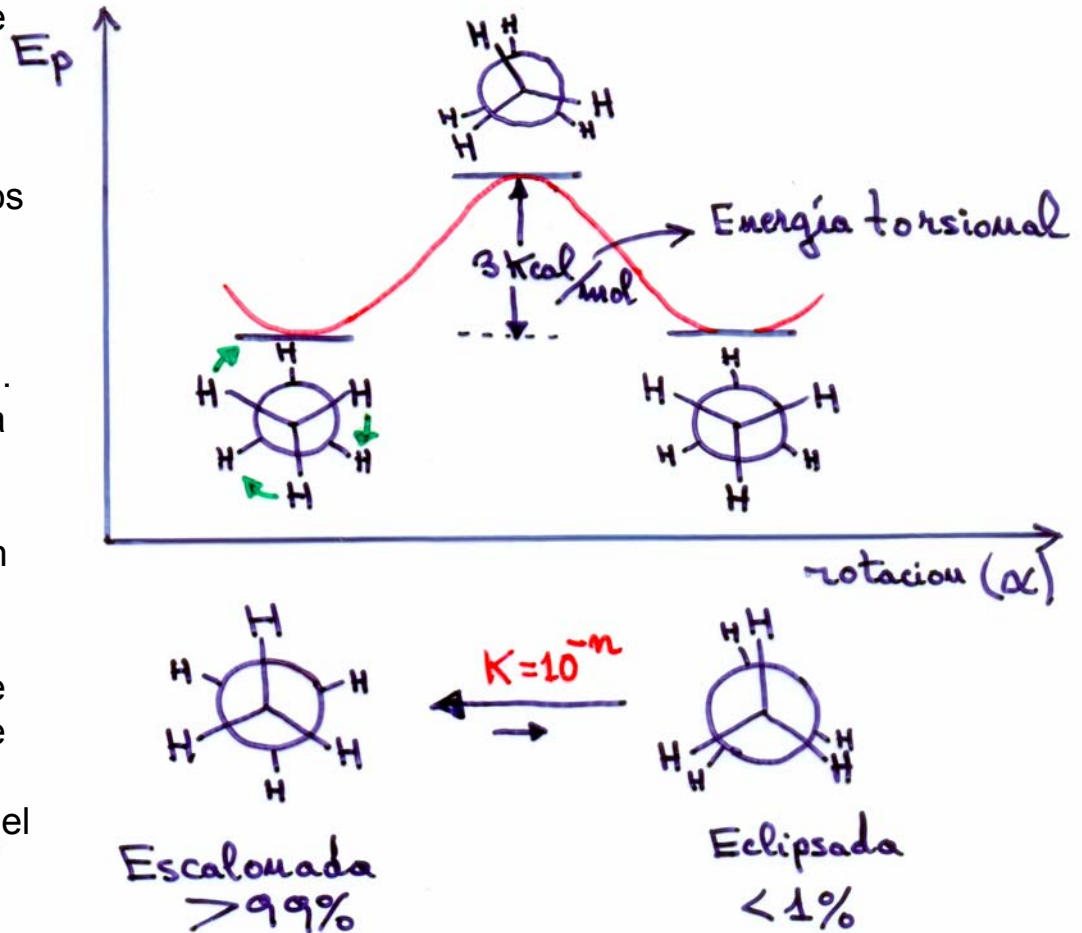
### ECLIPSADA



# 2.4.1 Diagramas de energía potencial

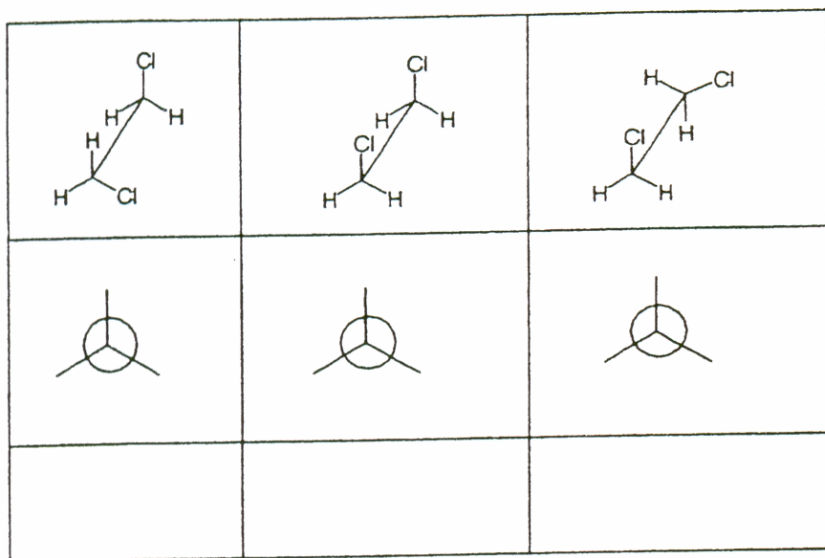
Las diferencias de energía entre las diferentes conformaciones pueden analizarse gráficamente representando los cambios de energía frente al ángulo de rotación

Las diversas conformaciones del etano no tienen todas idéntica energía potencial. Una explicación sencilla de este hecho se basa en la repulsión electrónica. Cuando giramos el grupo metilo alrededor del eje C-C, comenzando por la conformación alternada, la distancia entre los hidrógenos de cada grupo metilo disminuye gradualmente, dando lugar a un aumento de la repulsión entre los pares de electrones enlazantes de los enlaces C-H. La energía potencial del sistema aumenta de modo continuo a medida que el grupo metilo rota desde la conformación alternada a la conformación eclipsada. En este punto, la molécula tiene un máximo contenido energético, ya que los dos conjuntos de seis electrones de enlace se encuentran lo más cercanos posible. Este punto está  $3 \text{ Kcal mol}^{-1}$  por encima del estado de menor energía de la molécula, el conformero alternado. El cambio de energía resultante a partir de la rotación alrededor de un enlace se denomina **energía rotacional o torsional**.



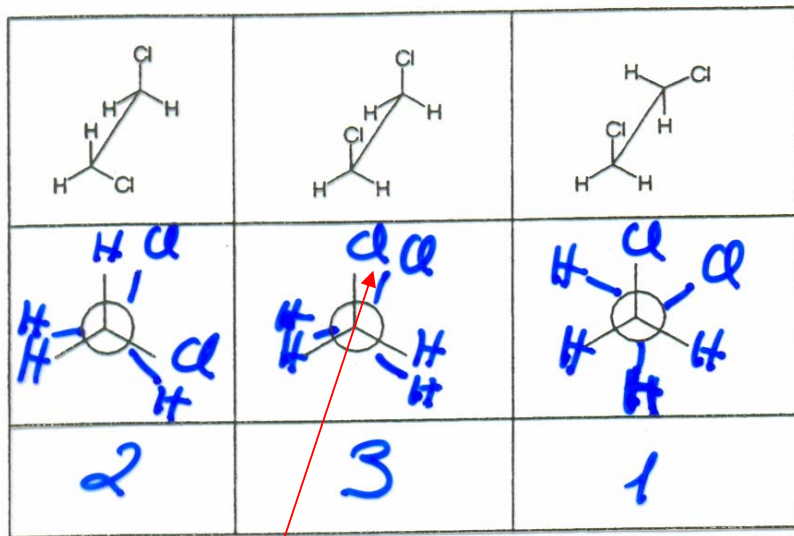
# Ejercicio de clase 2.1

- Pasar las 3 conformaciones del 1,2-dicloroetano representadas en proyección de caballete a proyección de Newman y ordenar de mayor a menor estabilidad ( $1 > 2 > 3$ ).





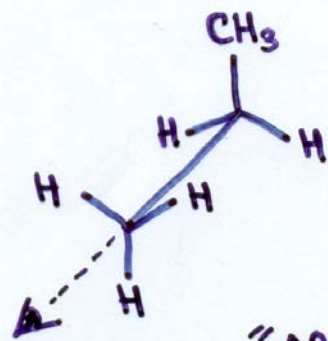
# Solución ejercicio de clase 2.1



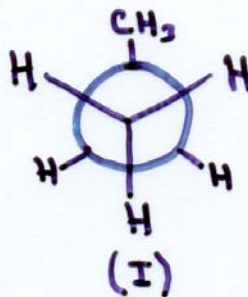
Tensión estérica ó impedimento estérico

- Siempre una conformación alternada es más estable que una eclipsada.
- Entre las dos conformaciones eclipsadas, es más inestable la que enfrenta dos Cloros.

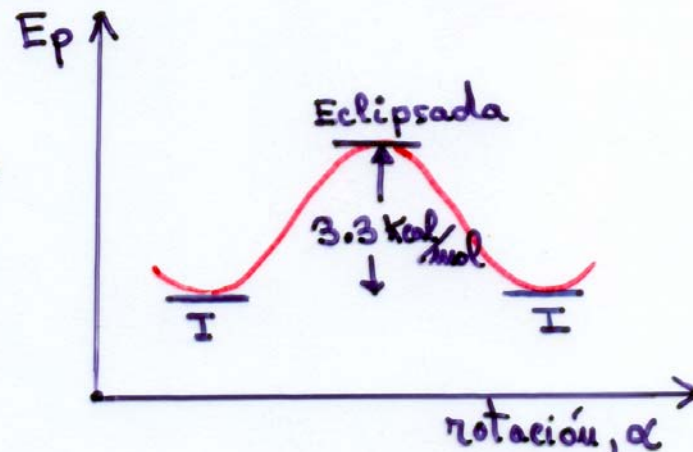
## CONFORMACIONES DEL PROPANO:



"Alternada"

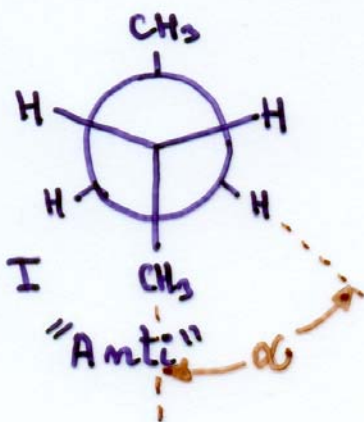


(I)

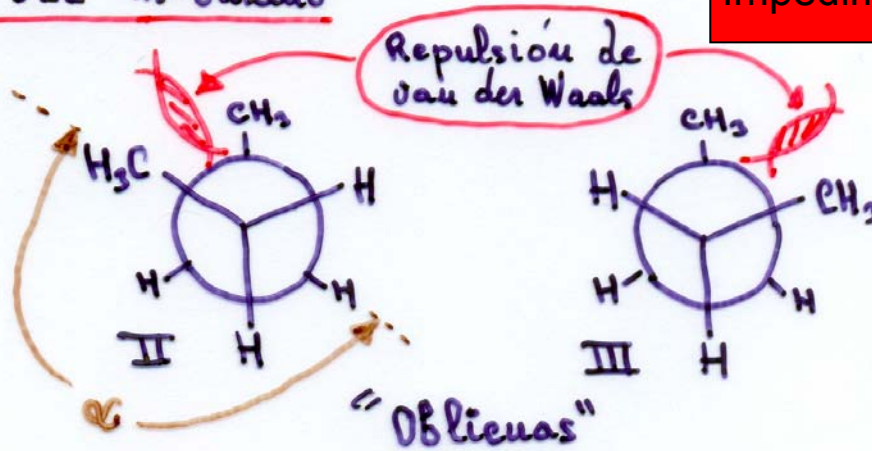


## CONFORMACIONES DEL "n-butano"

Impedimento estérico



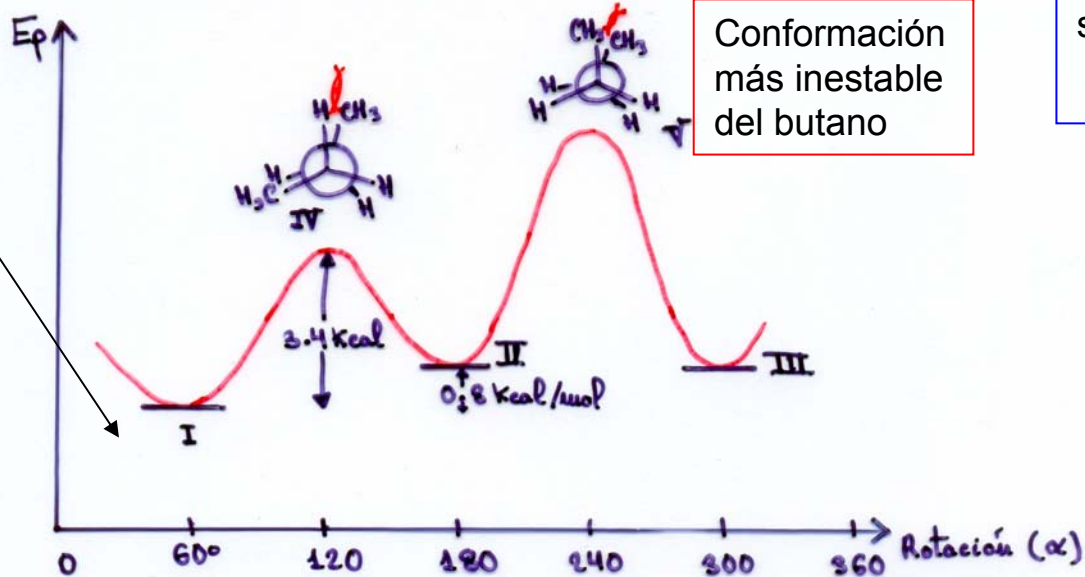
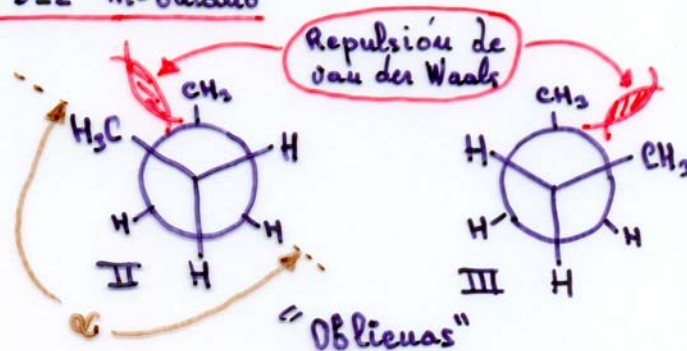
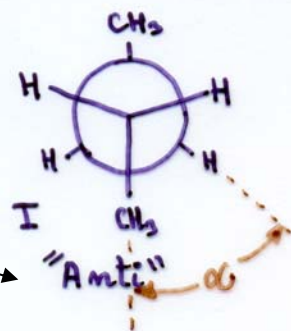
"Anti"



"Gauche"

## CONFORMACIONES DEL "n-butano"

Conformación más estable del butano



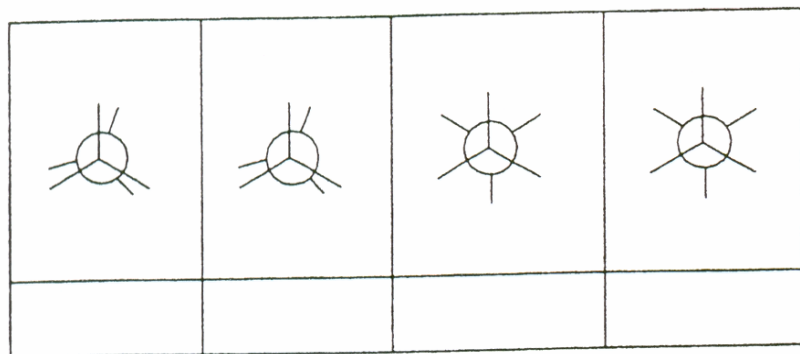
Conformación más inestable del butano

- Las dos posibles conformaciones alternadas del butano tienen el nombre de **Anti**, con los grupos metilo en posiciones opuestas, y **Oblicua o Gauche** (una palabra francesa que significa izquierda).

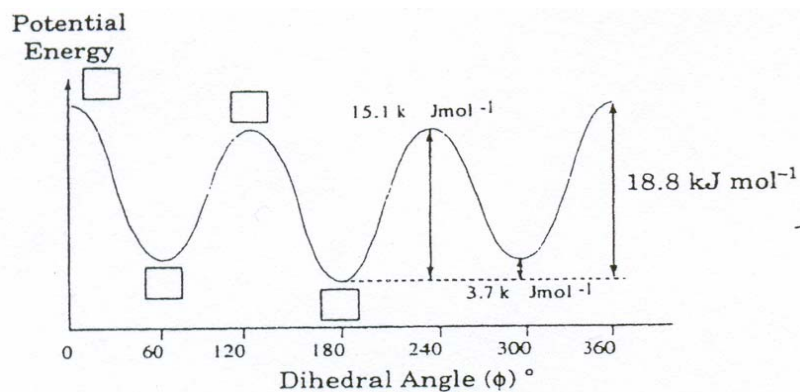
**PROBLEMA 2.2.-** Dibujar la conformación más estable (la conformación anti) de la siguiente molécula: 2,2-dimetilpentano (utilizar proyección de Newman para el enlace C<sub>3</sub>-C<sub>4</sub>)



# Problema 2.3



Exercise 1.3

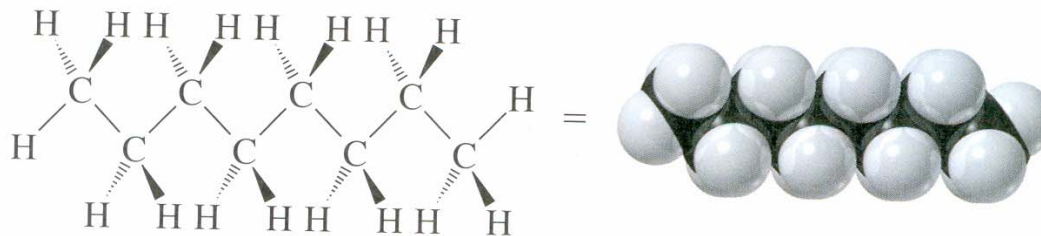


Exercise 1.4

- Dibujar la proyección de Newman de las dos posibles conformaciones eclipsadas y las dos alternadas para el butano (se considera el giro del enlace entre los carbonos centrales), ponerles nombre de la A a la D y usar las letras para colocarlas en el diagrama de energía.

## 2.4.2 Conformaciones de los alcanos de cadena larga.

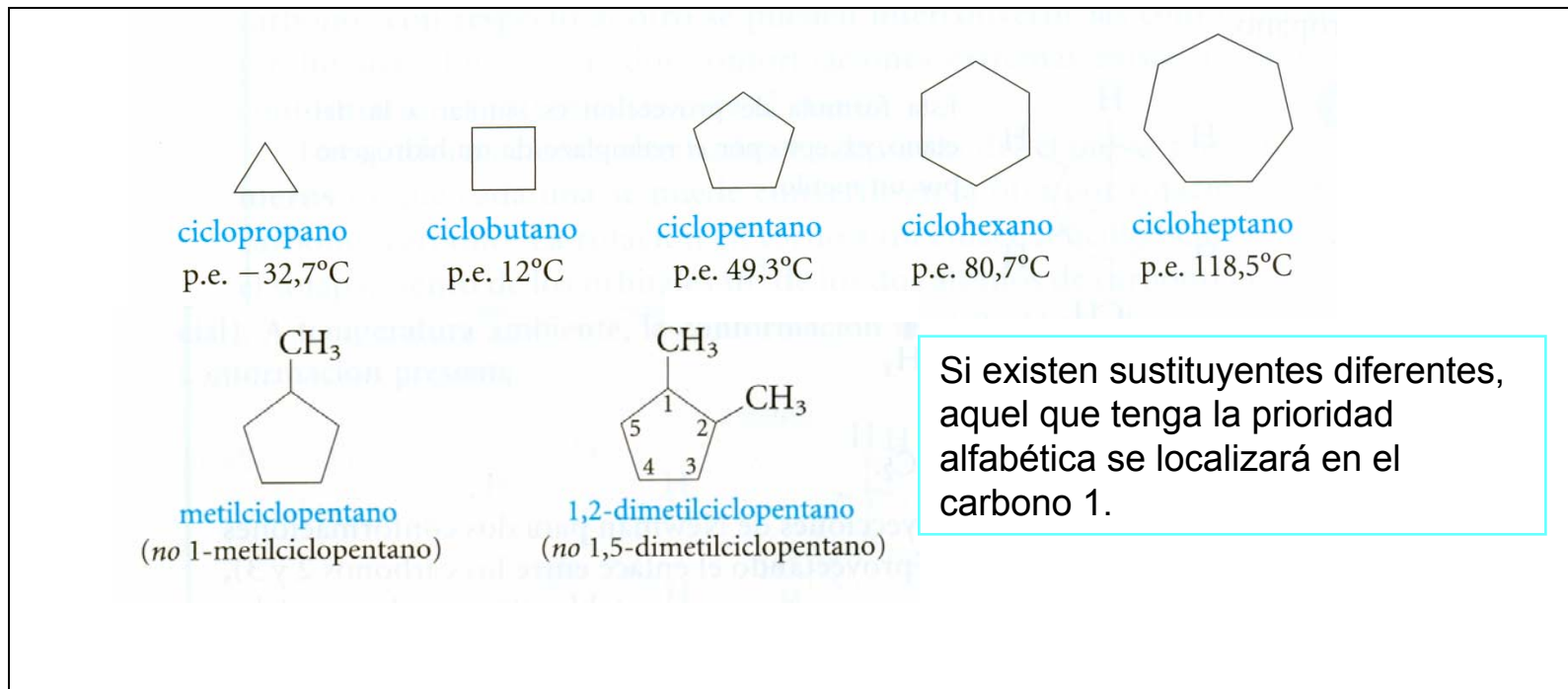
- Los alcanos de cadena larga se parecen al butano en su preferencia por las conformaciones anti y gauche en torno a sus enlaces carbono-carbono. La conformación de energía más baja para cualquier alcano de cadena lineal es la que tiene todos los enlaces carbono-carbono internos en conformaciones anti. Estas conformaciones anti dan a la cadena una forma de zigzag.



octano, conformación con todos los enlaces C—C en anti (todo anti)

# 2.5 Cicloalcanos

Los cicloalcanos son hidrocarburos saturados que tienen al menos un anillo formado con átomos de carbono. Se nombran colocando el prefijo *ciclo-* antes del nombre del alcano que corresponde al número de átomos de carbono del anillo. A continuación, se muestran las estructuras y los nombres de los primeros seis cicloalcanos no sustituidos, y alguno mono y di-sustituido.



**PROBLEMA 2.4** La fórmula general para un alcano es  $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$ . ¿Cuál es la fórmula general correspondiente a un cicloalcano con un anillo?

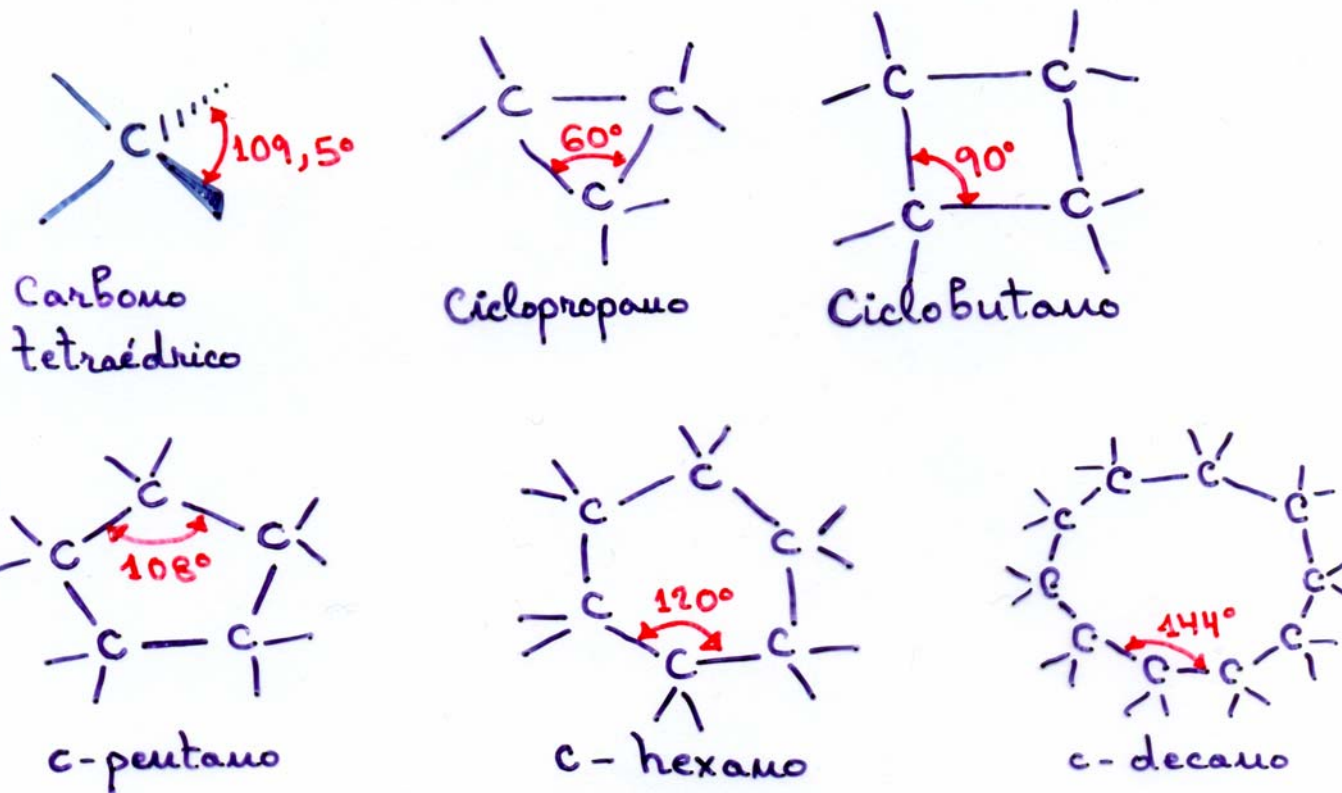
**PROBLEMA 2.5** Dibuje las fórmulas estructurales para: a) 1-etilciclopentano, b) 1,2,3-triclorociclopropano y c) 1-bromo-3-metilciclobutano.



## 2.6 Conformación de los cicloalcanos

El ciclopropano, con sólo tres átomos de carbono, es necesariamente plano (ya que tres puntos determinan un plano). El ángulo C-C-C es de sólo  $60^\circ$  (los carbonos forman un triángulo equilátero), mucho menor que el ángulo tetraédrico habitual de  $109,5^\circ$ . Los hidrógenos se encuentran por encima y por debajo del plano que forman los carbonos quedando los hidrógenos de carbonos adyacentes eclipsados.

Los cicloalcanos con más de tres átomos de carbono no son planos (lo que se expresa en estos dibujos no es la realidad) y tienen conformaciones plegadas más estables (con la menor energía de tensión).



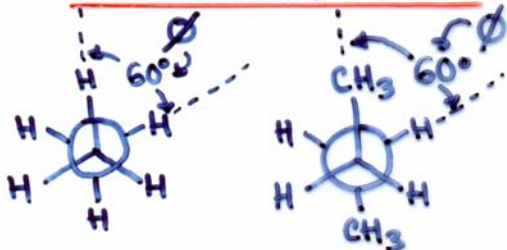
## 2.6.1 Factores que afectan a la estabilidad de las conformaciones de cicloalcanos

\* Tensión angular: Toda desviación de los ángulos de enlace tetraédricos normales,  $109,5^\circ$



normales,  $109,5^\circ$

\* Tensión torsional: Toda desviación de la conformación escalonada del etano o la anti del butano.

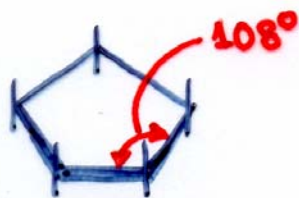


\* Tensión de Van der Waals (estérica): amontonamiento de átomos.

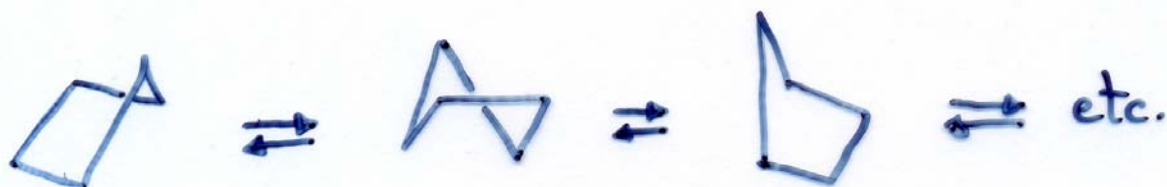


## 2.6.2 Conformaciones del ciclopentano y del ciclobutano

### Conformaciones del ciclopentano:



Ciclopentano plano: mucha tensión torsional, poca angular.



Conformación "sobre", la tensión torsional se alivia.

### Conformaciones del ciclobutano



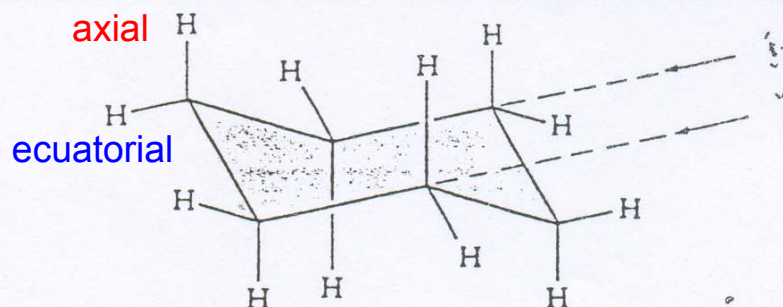
Tensión torsional aliviada.



## 2.6.3 Estudio conformacional del ciclohexano

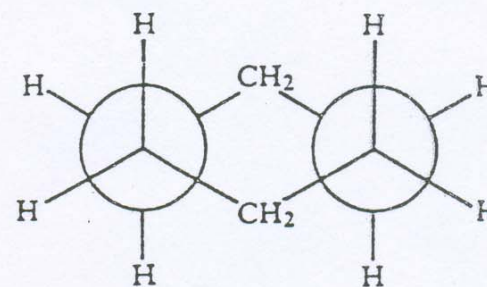
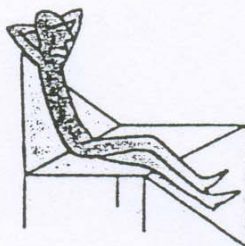
Los anillos de seis miembros son especiales y se han estudiado con gran detalle ya que son muy comunes en la naturaleza. Si el ciclohexano fuera plano, los ángulos internos C-C-C serían los de un hexágono regular,  $120^\circ$  mucho más grandes que los ángulos tetraédricos normales ( $109,5^\circ$ ). La tensión angular resultante, unida a la tensión torsional por eclipsamiento impide que el ciclohexano sea plano. Su conformación más favorable es la conformación de silla, una disposición en la que todos los ángulos C-C-C son de  $109,5^\circ$  y todos los hidrógenos de los átomos de carbono adyacentes se encuentran perfectamente alternados.

Vemos que en esta conformación la molécula tiene dos tipos de hidrógeno: seis enlaces C-H son casi paralelos al eje molecular principal y por ello se llaman **axiales**; los otros seis son prácticamente perpendiculares a dicho eje y se denominan por tanto **ecuatoriales**.



conformación en silla

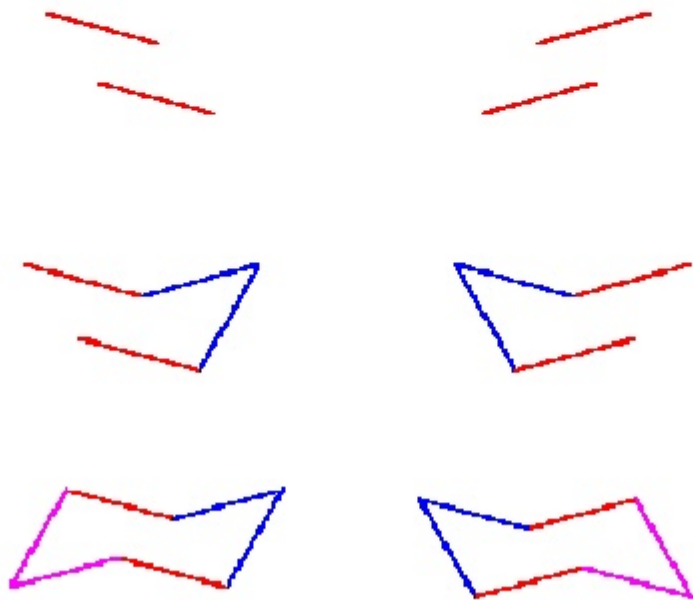
La conformación en silla del ciclohexano tiene un grupo metileno hacia arriba y otro hacia abajo. Vista con la proyección de Newman, la conformación de silla no tiene eclipsamiento de enlaces carbono-carbono. Los ángulos de enlace son  $109,5^\circ$ .



proyección de Newman

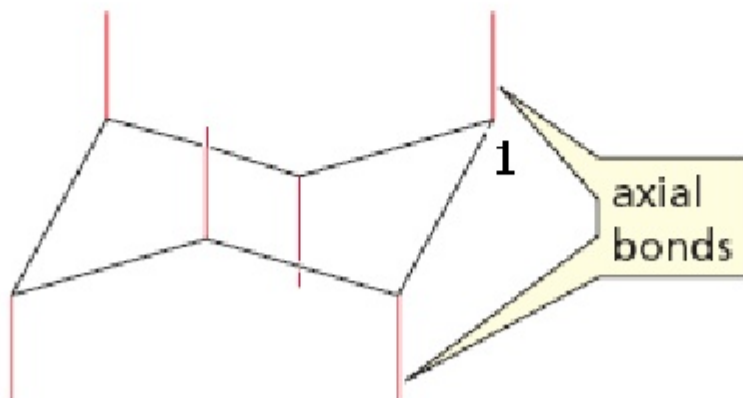
## ¿Cómo dibujar ciclohexanos en conformación de silla?

1.- Dibuje dos líneas paralelas una abajo y otra arriba un poco inclinadas. Conecte los carbonos más bajos con una “V” hacia arriba. Conecte los dos carbonos más altos con una “V” hacia abajo.



## ¿Cómo dibujar ciclohexanos en conformación de silla?

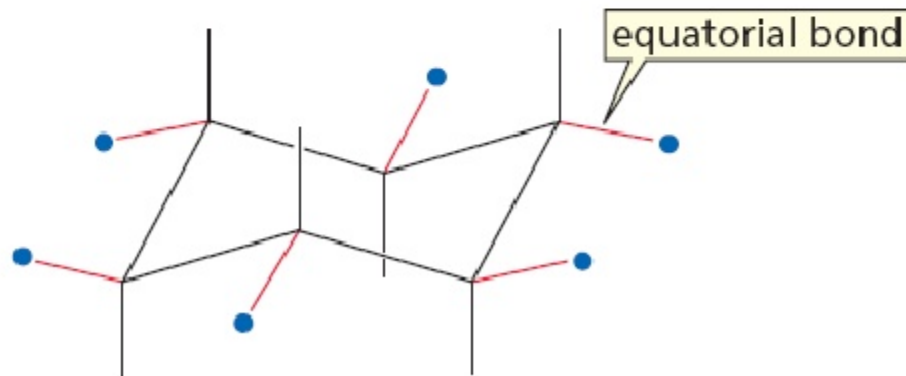
2.- En cada carbono hay una posición axial y otra ecuatorial que se alternan alrededor del anillo. Para colocar las posiciones axiales, dibuje la del carbono 1 hacia arriba si se trata de la conformación que deja al carbono 1 en la punta de la “V” invertida. El siguiente carbono tendrá el axial hacia abajo, el siguiente lo tendrá hacia arriba y así sucesivamente.





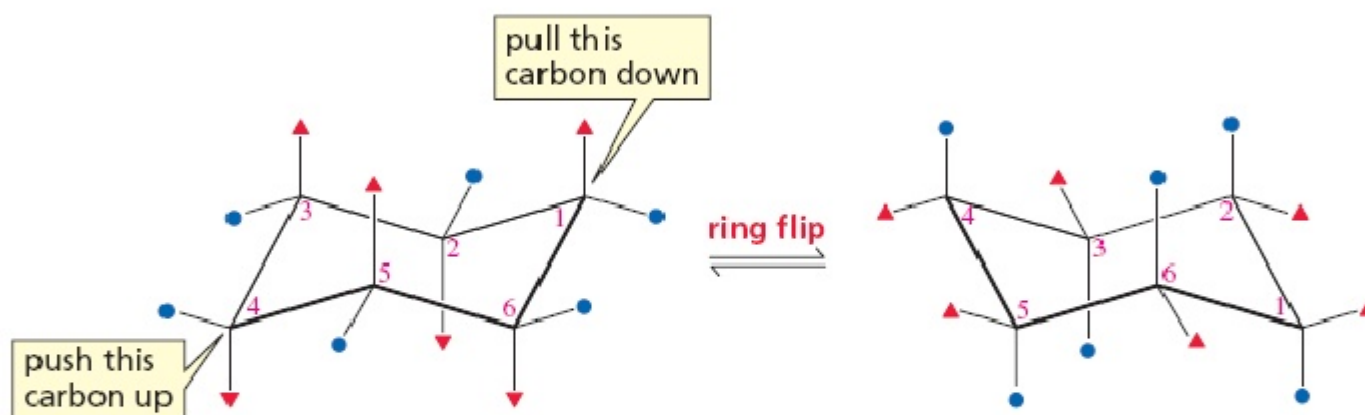
## ¿Cómo dibujar ciclohexanos en conformación de silla?

3.- Para dibujar las posiciones ecuatoriales (enlaces en rojo con punto azul): en el carbono donde haya un enlace axial apuntando hacia arriba, se dibuja un enlace ecuatorial apuntando hacia abajo y paralelo al enlace C-C del anillo situado “un enlace más allá”. Y cuando se encuentre un enlace axial apuntando hacia abajo, se dibuja un enlace ecuatorial hacia arriba y paralelo al enlace C-C del anillo situado “un enlace más allá”.

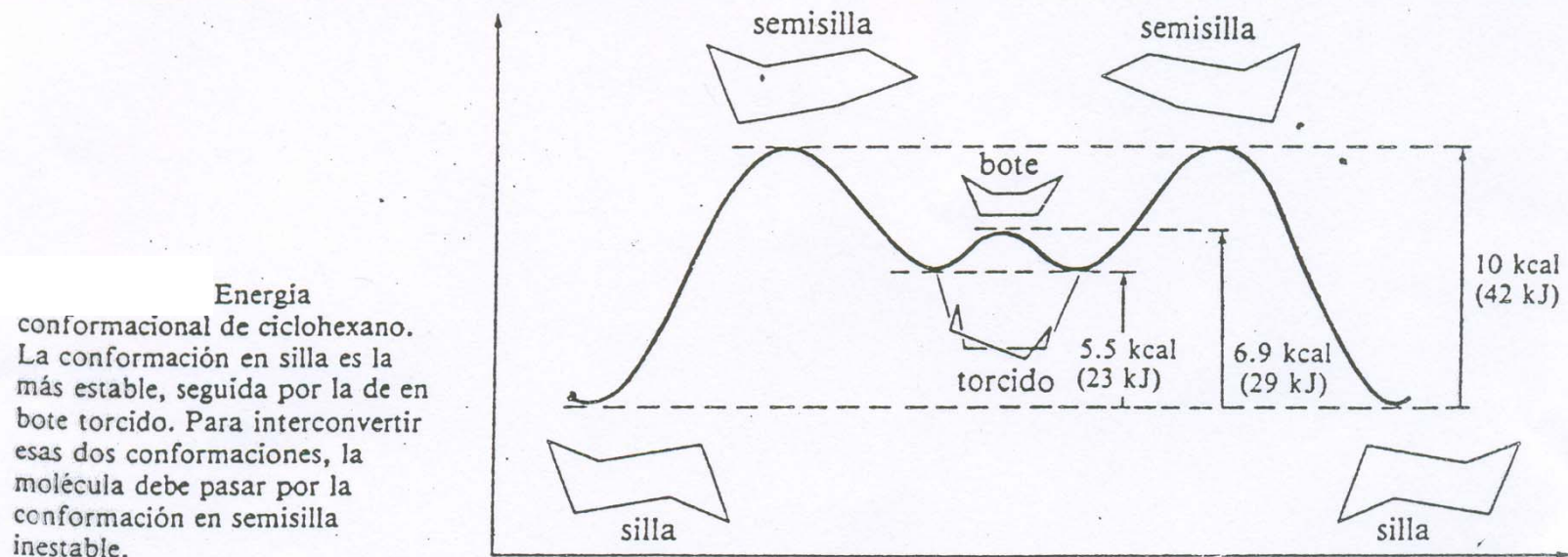


## ¿Cómo dibujar ciclohexanos en conformación de silla?

4.- Cuando un conformero de silla se invierte, entonces los enlaces axiales en un conformero pasan a enlaces ecuatoriales en el otro.



Y los enlaces ecuatoriales en un conformero pasan a enlaces axiales en el otro.



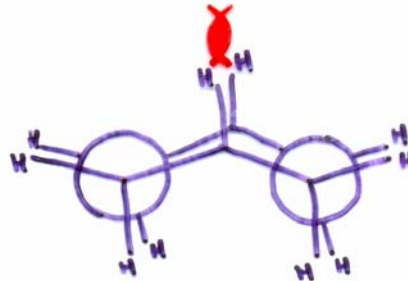
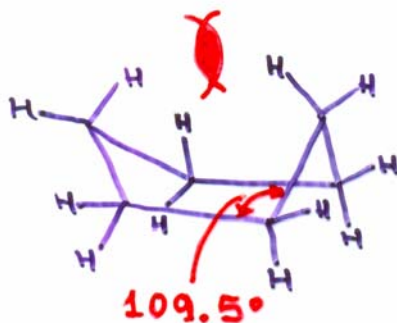
**El ciclohexano también puede adoptar otras conformaciones menos estables:** Una es la **forma de bote**, en la cual los carbonos 1 y 4 se hallan fuera del plano pero en la misma cara. La forma de bote es 6.9 Kcal mol<sup>-1</sup> menos estable que la de silla. Una razón para dicha diferencia es la disposición eclipsada de los ocho átomos de hidrógeno situados en la base del bote. La otra es el impedimento estérico entre los dos hidrógenos (sobre el C-1 y el C-4) que se proyectan hacia el interior del bote ([mirar figura de la página siguiente\\*](#)). El ciclohexano en conformación de bote es bastante flexible. Si uno de los enlaces C-C rota con relación al siguiente, la conformación experimenta cierta estabilización por eliminación parcial de la interacciones anteriormente descritas. La nueva conformación así obtenida se denomina **bote torcido** (o, más corrientemente, forma "twist"). La estabilización de esta forma con respecto al bote es de 1.4 Kcal mol<sup>-1</sup>.

En la figura de arriba queda claro que las conformaciones más estables del ciclohexano son las de silla, y que éstas se pueden interconvertir pasando por otras conformaciones más inestables. Este equilibrio es muy importante para entender cómo afecta la presencia de sustituyentes en el anillo.

## \*CONFORMACIÓN DE BOTE DEL CICLOHEXANO

En este dibujo se aprecia disposición eclipsada de los ocho átomos de hidrógeno situados en la base del bote. También se indica el impedimento estérico entre los dos hidrógenos (sobre el C-1 y el C-4) que se proyectan hacia el interior del bote

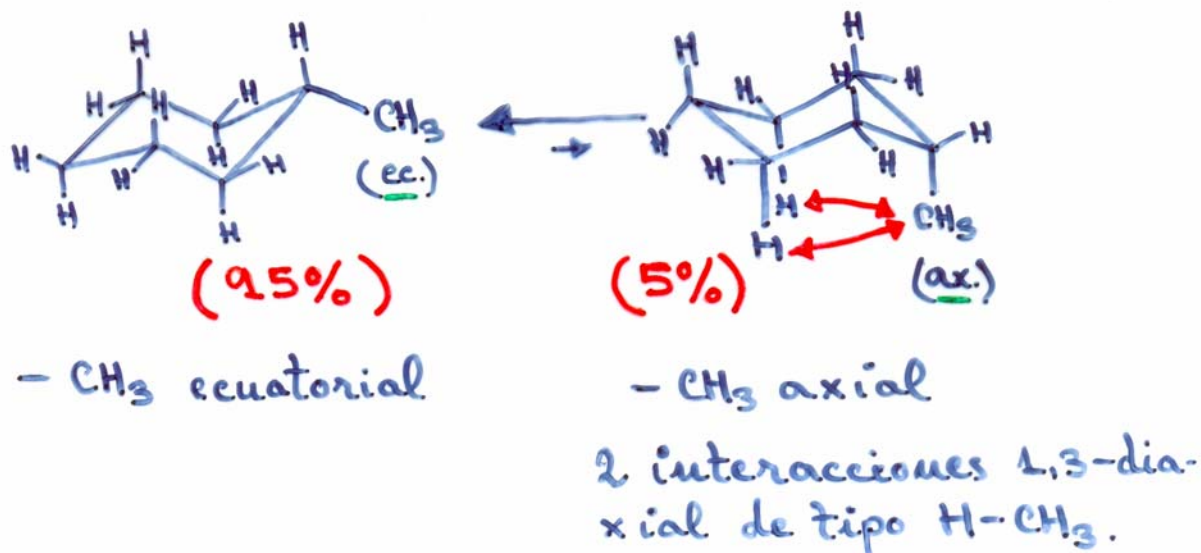
\* Conformación BOTE:





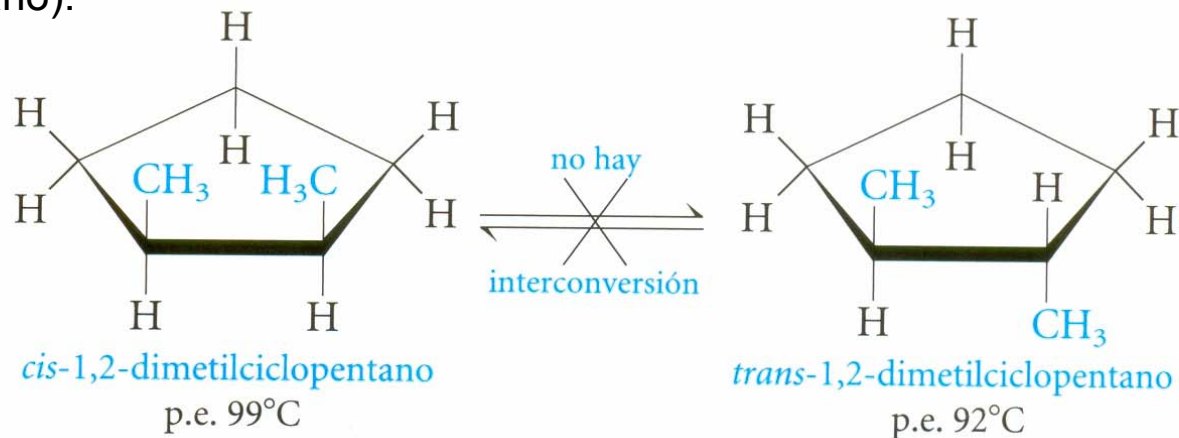
## 2.6.4 Conformaciones de ciclohexanos sustituidos

Consideremos el alquilociclohexano más sencillo, el metilciclohexano. En el metilciclohexano, el grupo metilo puede ocupar una posición ecuatorial o axial. ¿Son ambas conformaciones equivalentes? Es evidente que no. En el conformero ecuatorial, el grupo metilo se halla alejado en el espacio del resto de la molécula. Por el contrario, en el conformero axial, el sustituyente metilo se encuentra cercano a los dos hidrógenos axiales del mismo lado de la molécula. La distancia a estos dos hidrógenos es lo suficientemente pequeña (unos 2.7 Å) para dar lugar a una repulsión estérica que se denomina interacción 1,3-diaxial. Las dos conformaciones de silla del metilciclohexano están en equilibrio. *El conformero ecuatorial es 1.7 Kcal mol<sup>-1</sup> más estable y es la forma mayoritaria en el equilibrio* en una proporción de 95:5 a 25°C. Para predecir el conformero más estable en ciclohexanos polisustituidos debemos analizar aquel que tenga menos interacciones 1,3-diaxiales.



## 2.7 Isomería cis-trans en cicloalcanos

La **estereoisomería** se refiere a moléculas que presentan el mismo orden de unión a los átomos, pero diferentes disposiciones de los átomos en el espacio. La **isomería cis-trans** (llamada también **isomería geométrica**) es una clase de estereoisomería, y se comprende más fácilmente con un caso específico. Considere, por ejemplo, las estructuras posibles del 1,2-dimetilciclopentano. Para simplificar no se tiene en cuenta el ligero plegamiento del anillo y se dibuja como si fuera plano. Los dos grupos metilo pueden estar del mismo lado del plano del anillo o hacia lados contrarios. Se dice que los grupos metilo, se encuentran en **cis** (del latín del mismo lado) o **trans** (del latín, del otro lado) uno con respecto a otro. Los isómeros cis-trans difieren uno del otro sólo en la forma en la que se colocan en el espacio los átomos o grupos de átomos. Esta diferencia es suficiente para darles propiedades físicas y químicas diferentes. (Observe, por ejemplo, los puntos de ebullición debajo de las estructuras de los 1,2-dimetilciclopentano).



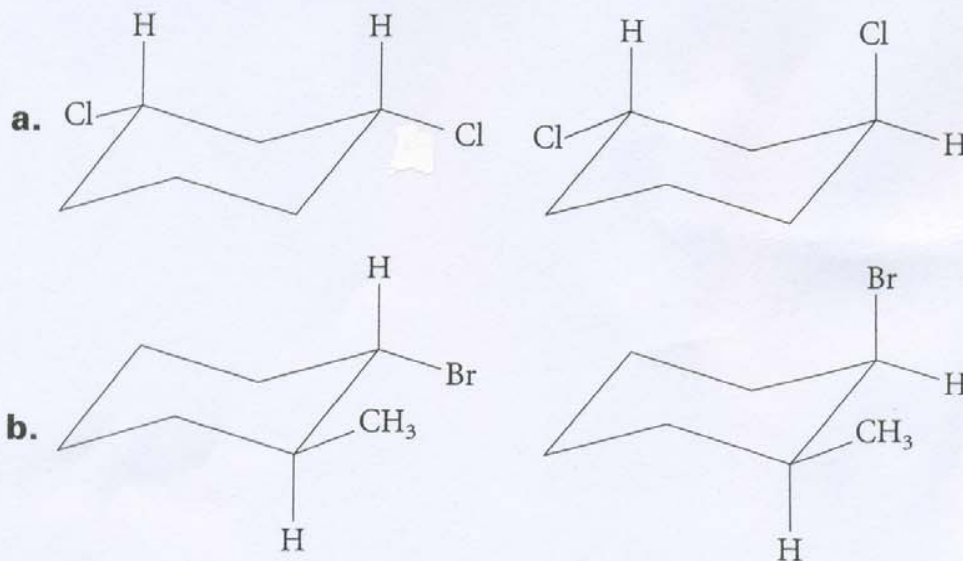
# PROBLEMAS:

## Conformaciones de los cicloalcanos; isomería *cis-trans*

**2.6** Dibuje la fórmula para la conformación preferida de:

- a.** bromociclohexano.                      **b.** *trans*-1,4-dimetilciclohexano.  
**c.** *cis*-1-etil-3-metilciclohexano.      **d.** 1,1-diclorociclohexano.

**2.7** Nombre los siguientes pares *cis-trans*:

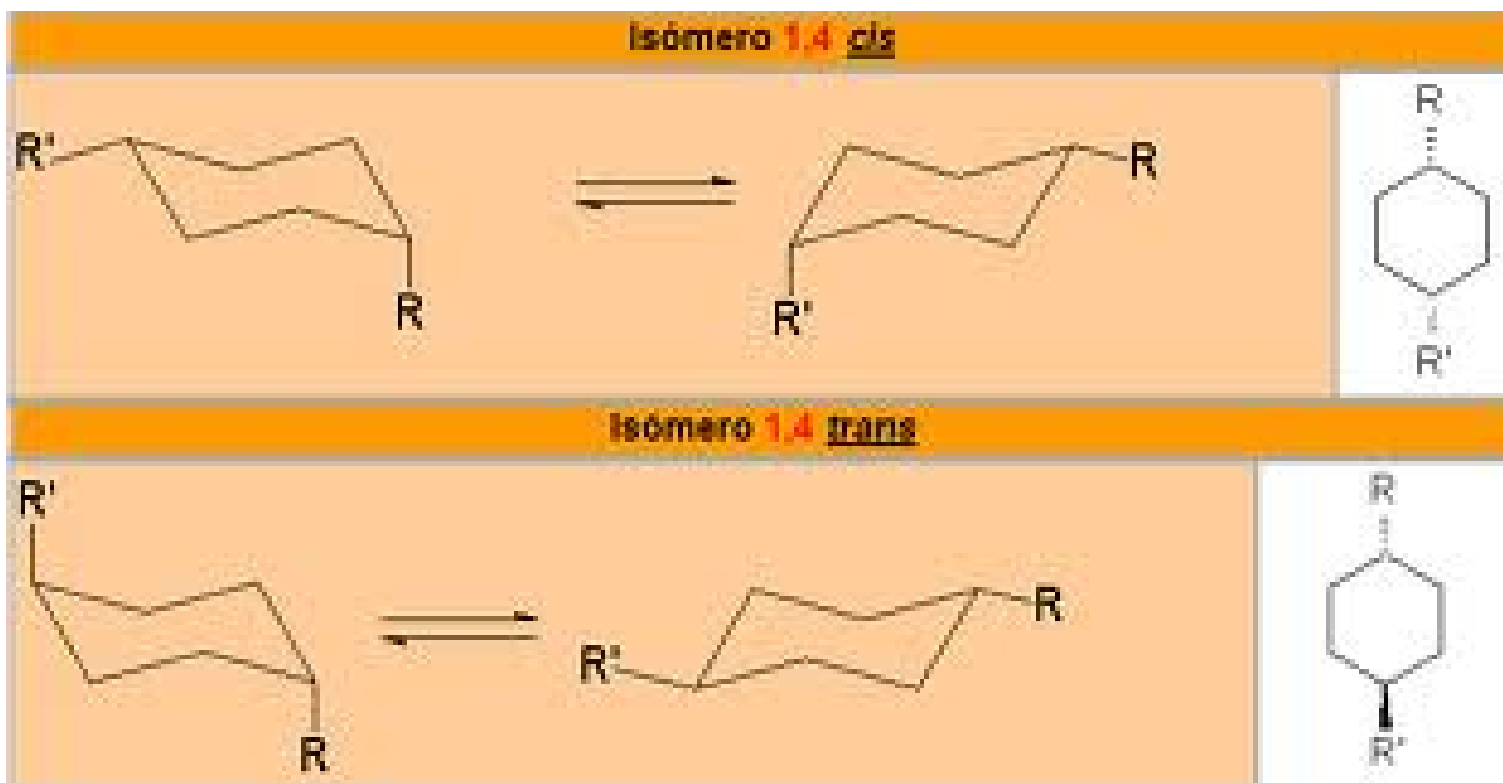


**2.8** Con ayuda de las estructuras conformacionales, explique por qué el *cis*-1,3-dimetilciclohexano es más estable que el *trans*-1,3-dimetilciclohexano, mientras que el orden de estabilidad observado para los isómeros 1,2 y 1,4 es el inverso. (Construir los modelos le ayudará con este problema).

Lo  
hacemos  
en clase

¿Cual será más estable, el *cis* o el *trans*-1,4-di-*terc*-butilciclohexano? Explique su respuesta dibujando las estructuras conformacionales para cada compuesto.

## SOLUCIÓN PROBLEMA ANTERIOR

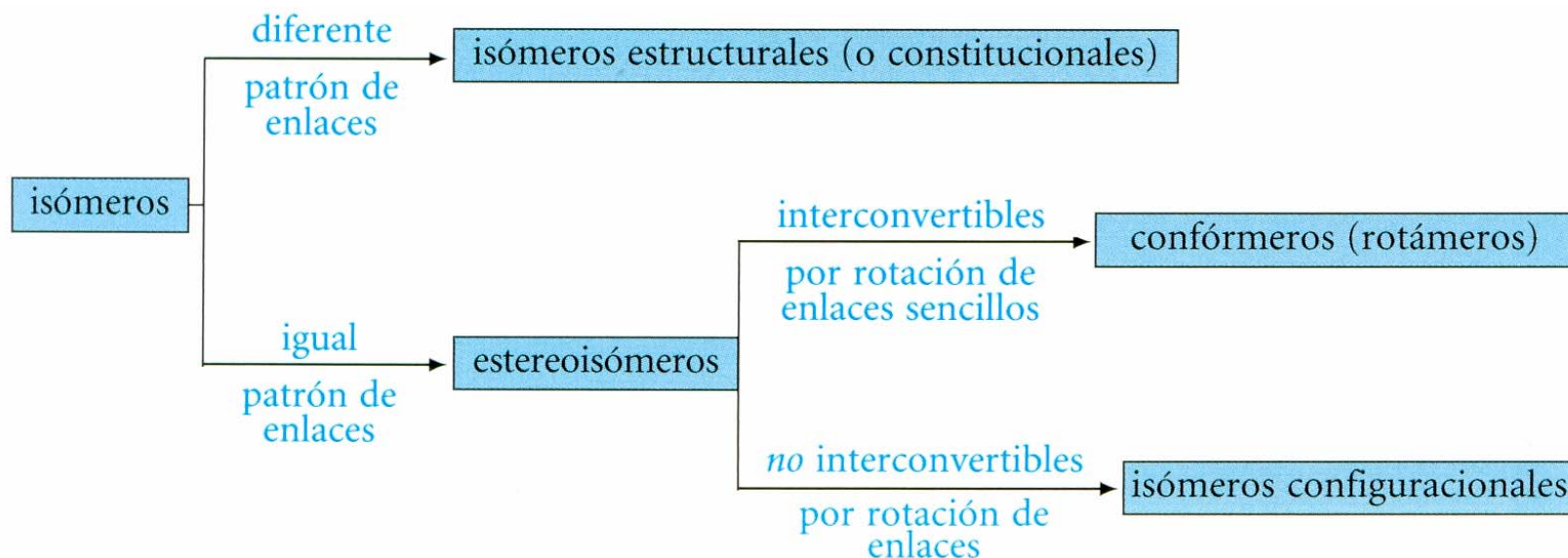


La conformación diecuatorial (la más estable de todas) sólo es posible en el isómero 1,4 *trans*, y por ello es más estable que el isómero 1,4 *cis*.



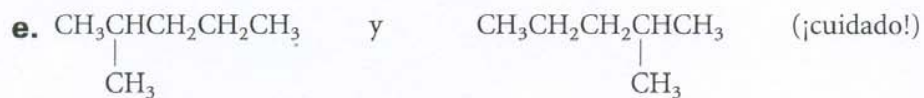
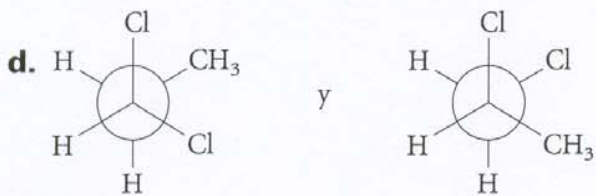
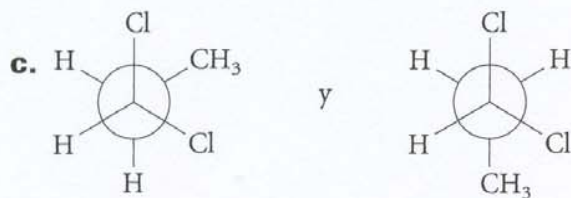
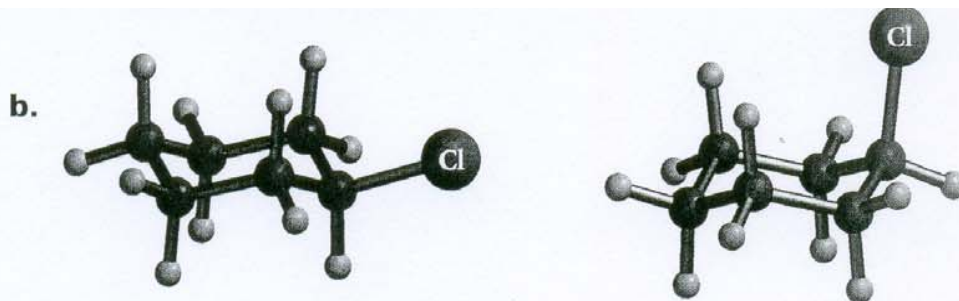
## 2.8 Resumen de isomería

En este punto puede ser útil resumir la relación de las diferentes clases de isómeros estudiadas hasta ahora. Estas relaciones se perfilan en la figura de abajo. Lo primero que hay que observar en un par de isómeros son sus patrones de enlace (o conectividades atómicas). Si los patrones de enlace son diferentes, los compuestos son **isómeros estructurales** (o **constitucionales**), como por ejemplo el [etanol](#) y el [metoximetano](#). Pero si los patrones de enlace son los mismos, los compuestos son **estereoisómeros**. Si la rotación de un enlace sencillo interconvierte fácilmente los dos estereoisómeros (como en el caso del [etano alternado](#) y [eclipsado](#)), se llaman **confórmers**. Si los dos estereoisómeros pueden interconvertirse sólo por ruptura y formación de enlaces (como en el caso del [cis-trans-1,2-dimetilciclopentano](#)), se llaman isómeros **configuracionales**.



**PROBLEMA 2.9.-** Teniendo en cuenta el esquema anterior de isomería, clasifique cada uno de los siguientes pares de estructuras como isómeros estructurales, conformeros, isómeros configuracionales (cis-trans) ó estructuras idénticas:

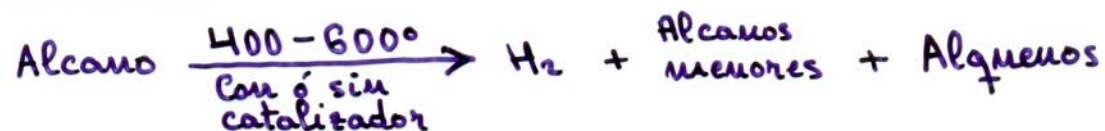
a. Los pares de compuestos del **problema 2.7**



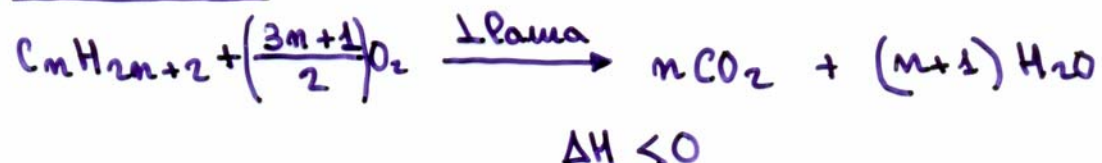
## 2.9 Reacciones de los alcanos

En los alcanos, todos los enlaces son sencillos, covalentes y no polares, de ahí que sean relativamente inertes. Sólo podemos transformarlos rompiendo homolíticamente sus enlaces a altas temperaturas (pirólisis) o por reacción con oxígeno y con halógenos.

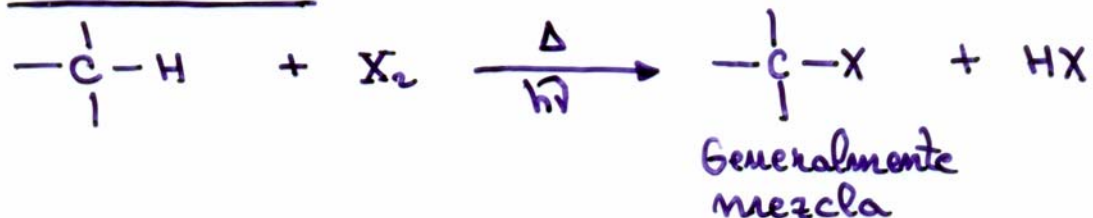
### a) PIROLISIS



### b) COMBUSTION

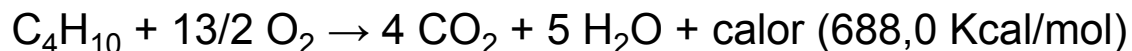
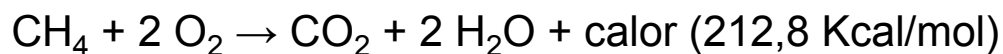


### c) HALOGENACION



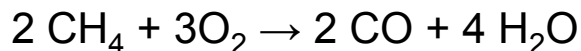
## 2.9.1 Oxidación y combustión; los alcanos como combustibles.

El uso más importante de los alcanos es como combustible. Con un exceso de oxígeno, los alcanos se queman para formar dióxido de carbono y agua. Lo más importante, es que las reacciones desprenden un calor considerable (es decir, las reacciones son **exotérmicas**).



Estas reacciones de combustión son la base para el uso de los hidrocarburos como fuentes de calor (gas natural y combustible para calefacción) y como combustibles para motores (la gasolina). Se requiere un paso iniciador –normalmente la ignición producida por una chispa o una llama-. Una vez que se ha iniciado, la reacción procede espontáneamente y de forma exotérmica.

La **combustión** es una **reacción de oxidación**, en la que se reemplazan los enlaces C-H por enlaces C-O. En el metano, el carbono se encuentra en su forma más reducida. En el dióxido de carbono, el carbono está en su forma más oxidada. También se conocen estados de oxidación intermedios para el carbono, en los que sólo uno, dos o tres de los enlaces C-H se convierten en enlaces C-O. No debe sorprender, entonces, que si el oxígeno disponible para la combustión completa de un hidrocarburo es insuficiente, pueda ocurrir una oxidación parcial, como la que origina el monóxido de carbono, tóxico, de los gases de escape.





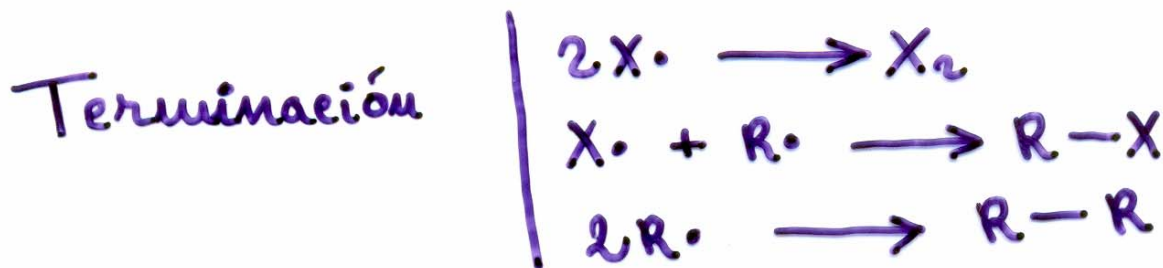
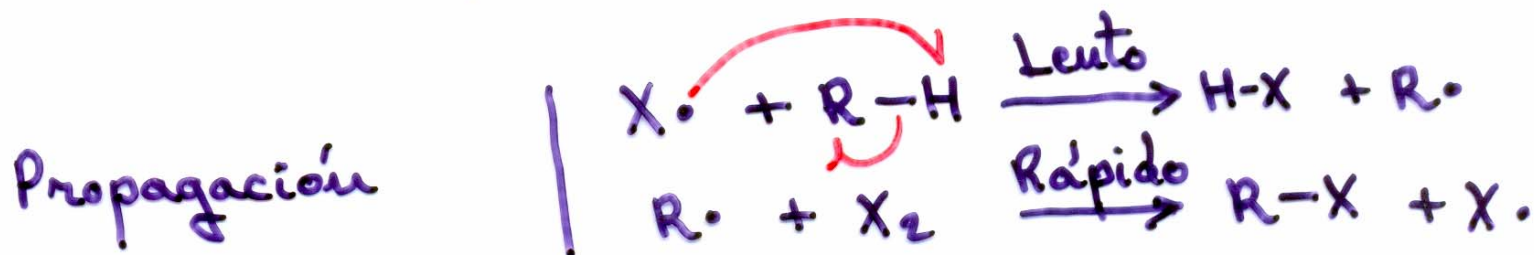
## 2.9.2 Halogenación de alcanos (reacción de sustitución radicalaria)

Cuando se mezclan un alcano (RH) y cloro o bromo ( $X_2$ ) en fase gaseosa, a temperatura ambiente y en ausencia de luz, no hay reacción. La mezcla debe calentarse a temperaturas por encima de  $300^\circ\text{C}$  o bien irradiar con luz ultravioleta para que la reacción ocurra.



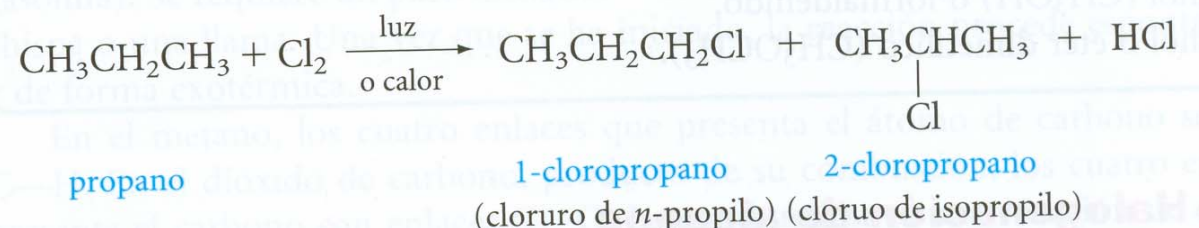
Si hay un exceso de halógeno, la reacción puede continuar hasta formar productos polihalogenados. Abajo observamos el mecanismo del proceso.

\* MECANISMO: reacción en cadena.

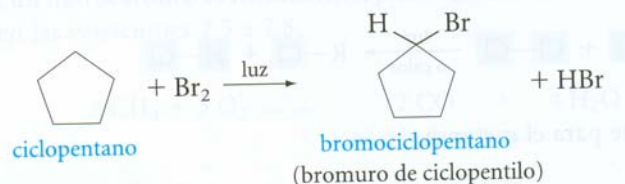


# ¿Es la halogenación un método útil para sintetizar haluros específicos puros?

- Cuando se utilizan alcanos de cadenas largas se pueden obtener mezclas de productos incluso en la monohalogenación.



- Sin embargo, cuando todos los hidrógenos de una molécula son equivalentes, se puede obtener un solo producto orgánica en forma pura.



**PROBLEMA 2.10** ¿Cree que la cloración del 2,2-dimetilpropano puede ser útil sintéticamente?

# ¿Se puede pronosticar la proporción de los distintos productos de halogenación?

- Son tres los factores que determinan los rendimientos relativos del producto isómero:
  - (1) El factor de probabilidad:** Este factor está basado en el número de cada clase de átomos de H en la molécula. Por ejemplo, en  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$  hay seis  $\text{H } 1^\circ$  equivalentes y dos  $\text{H } 2^\circ$  equivalentes. Al separar un  $\text{H } 1^\circ$ , las probabilidades serían 6 a 2 o 3 a 1.
  - (2) Reactividad del H:** El orden de reactividad del H es  $3^\circ > 2^\circ > 1^\circ$  dado que los radicales obtenidos en el proceso tienen ese orden de estabilidad.
  - (3) Reactividad del X·:** El  $\text{Cl}\cdot$ , que es más reactivo, es menos selectivo y recibe mayor influencia del factor de probabilidad. El  $\text{Br}\cdot$ , que es menos reactivo, es más selectivo y tiene menor influencia del factor de probabilidad.

**Problema de ejemplo 1:** Calcule los porcentajes de los isómeros esperados durante la monocloración del propano a temperatura ambiente. Las reactividades relativas de los átomos de hidrógeno  $2^\circ$  y  $1^\circ$  son 3,8 y 1,0 respectivamente.

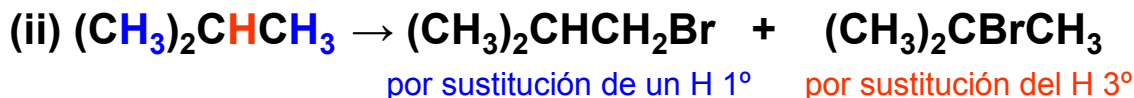
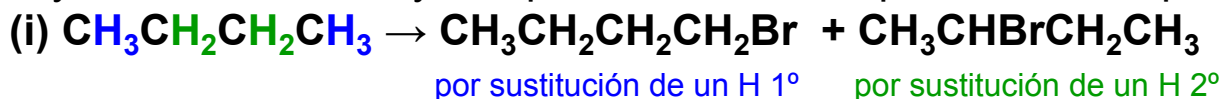
	Átomos de H		×	Reactividad rel. del átomo de H	=	Reactividad ponderada	Proporción × 100%	=	Porcentaje de rendimiento
	Clase	Número							
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$	$1^\circ$	6	×	1,0	=	6,0	6/13,6	=	44
$\text{CH}_3\text{CHClCH}_3$	$2^\circ$	2	×	3,8	=	7,6	7,6/13,6	=	56
						TOTAL 13,6			

### Problema de ejemplo 2:

- (a) Haga una lista de los derivados monobromados de  
(i)  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$  y de (ii)  $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_3$ .
- b) Prediga el isómero predominante en cada caso. El orden de reactividad del H para la bromación es:  $3^\circ (1600) > 2^\circ (82) > 1^\circ (1)$ .

### Solución:

- (a) Hay dos clases de H, y dos posibles isómeros para cada compuesto:



- (b) En la bromación, en general, la diferencia en reactividad anula casi por completo el efecto de probabilidad en la determinación del rendimiento del producto. Así: en el caso (i) el producto mayoritario es el que se obtiene al sustituir un H  $2^\circ$  (82 veces más reactivo que un H  $1^\circ$ )



en el caso (ii) el producto mayoritario es el que se obtiene al sustituir el H  $3^\circ$  (1600 veces más reactivo que un H  $1^\circ$ )



**PROBLEMA 2.11** ¿Cuál sería el producto mayoritario de la monobromación del 2-metilbutano?