

■ Actividades

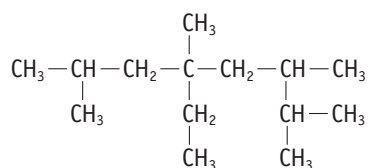
1. Describe las características del enlace carbono-carbono en los alquenos y los alquinos.

En los alquenos hay un doble enlace C=C. Uno de ellos es un enlace sigma (σ) que se produce por solapamiento frontal de dos orbitales híbridos sp^2 ; el otro enlace intercarbónico es un enlace pi (π) que se forma por solapamiento lateral de los orbitales p , sin hibridar, y que son perpendiculares al plano formado por los tres orbitales híbridos sp^2 , de manera que el enlace pi se sitúa por encima y por debajo del enlace sigma.

En los alquinos hay un triple enlace intercarbónico C \equiv C. Uno de ellos es un enlace sigma formado por solapamiento frontal de dos orbitales híbridos sp ; los otros dos son enlaces pi, similares al de los alquenos, uno situado por encima y por debajo del enlace sigma y el otro por delante y por detrás de dicho enlace.

2. Escribe una cadena carbonada en la que al menos haya un carbono primario, uno secundario, uno terciario y uno cuaternario.

Pregunta abierta. Podría ser:



3. Indica la hibridación que cabe esperar de cada uno de los átomos de carbono que participan en los siguientes compuestos:

a) Propanona: $\text{CH}_3 - \text{CO} - \text{CH}_3$

b) Propino: $\text{CH}_3 - \text{C} \equiv \text{CH}$

c) 3-butenonitrilo: $\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{C} \equiv \text{N}$

a) Propanona: ${}^1\text{CH}_3 - {}^2\text{CO} - {}^3\text{CH}_3$

–El C-1 tiene hibridación sp^3 , y por tanto admite 4 enlaces sencillos sigma (con los 3 hidrógenos y el C-2) con orientación tetraédrica.

–El C-2 tiene hibridación sp^2 , formando 3 enlaces sencillos sigma (con el C-1, el oxígeno y el C-3) en el mismo plano y ángulos de 120° entre sí; además, un enlace pi (C=O) por encima y por debajo de dicho plano.

–El C-3 tiene hibridación sp^3 y una estructura de enlaces similar al C-1.

b) Propino: ${}^3\text{CH}_3 - {}^2\text{C} \equiv {}^1\text{CH}$

–El C-1 tiene hibridación sp con dos enlaces sencillos sigma (con un H y con el C-2) y dos enlaces pi, uno por encima y otro por debajo del enlace sigma y otro por delante y por detrás de dicho enlace.

–El C-2 tiene hibridación sp similar al C-1, pero sus enlaces sigma los realiza con el C-1 y el C-3.

–El C-3 tiene hibridación sp^3 similar al C-1 de la propanona.

c) 3-butenonitrilo: ${}^4\text{CH}_2 = {}^3\text{CH} - {}^2\text{CH}_2 - {}^1\text{C} \equiv \text{N}$

–El C-1 tiene hibridación sp similar al C-1 del propino; los dos enlaces sencillos sigma son con el C-2 y con el N y los dos enlaces pi son con el nitrógeno.

–El C-2 tiene hibridación sp^3 y forma 4 enlaces sencillos sigma, con orientación tetraédrica; dos con los hidrógenos, uno con el C-1 y otro con el C-3.

–El C-3 tiene hibridación sp^2 con tres enlaces sencillos sigma (C 3 -C 2 ; C 3 -H; C 3 -C 4), en el mismo plano y ángulos de 120° entre ellos, y un enlace pi con el C-4.

–El C-4 tiene también hibridación sp^2 , formando tres enlaces sencillos sigma (con los dos hidrógenos y el C-3) y un enlace pi con el C-3.

4. El DDD «rotano» es un insecticida con propiedades similares al DDT. Está formado por un 52,5% de carbono, un 44,4% de cloro y un 3,1% de hidrógeno y, en estado gaseoso, una masa de 1,6 g ocupa un volumen de 140 mL medidos a 120°C y 1,15 atm. Determina sus fórmulas empírica y molecular.

Determinamos la fórmula empírica con el porcentaje de cada elemento que tiene el compuesto:

$$52,5 \text{ g C} \cdot \frac{1 \text{ mol C}}{12 \text{ g C}} = 4,375 \text{ moles C}$$

$$44,4 \text{ g Cl} \cdot \frac{1 \text{ mol Cl}}{35,5 \text{ g Cl}} = 1,25 \text{ moles Cl}$$

$$3,1 \text{ g H} \cdot \frac{1 \text{ mol H}}{1 \text{ g H}} = 3,1 \text{ moles H}$$

Dividiendo estos valores entre el valor más pequeño, 1,25, se obtiene la proporción más sencilla entre los elementos.

$$\begin{array}{l}
 4,375 \text{ moles C}/1,25 = 3,5 \\
 1,25 \text{ moles Cl}/1,25 = 1 \\
 3,1 \text{ moles H}/1,25 = 2,5
 \end{array}$$

Multiplicando estos cocientes por 2 para tener valores enteros, obtenemos la fórmula empírica del compuesto: $\text{C}_7 \text{Cl}_2 \text{H}_5$

Para hallar la fórmula molecular se utilizan los otros datos que proporciona el enunciado del problema:

$$\begin{aligned}
 pV &= nRT \rightarrow pV = \frac{mRT}{M \text{ mol}} \rightarrow M \text{ mol} = \frac{mRT}{pV} = \\
 &= \frac{1,6 \text{ g} \cdot 0,082 \text{ atm L/mol} \cdot \text{K} \cdot 393 \text{ K}}{1,15 \text{ atm} \cdot 0,140 \text{ L}} = 320 \text{ g/mol}
 \end{aligned}$$

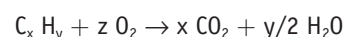
El número de veces que la masa molecular (320) engloba a la masa de la fórmula empírica (160) es:

$$n = \frac{320}{160}; n = 2$$

Y por tanto, la fórmula molecular será: $(\text{C}_7 \text{Cl}_2 \text{H}_5)_2 \Leftrightarrow \text{C}_{14} \text{Cl}_4 \text{H}_{10}$

5. Determina la fórmula empírica y la fórmula molecular de un hidrocarburo, si en la combustión de 2,8 g de ese compuesto se han obtenido 8,8 g de CO_2 y 3,6 g de H_2O , y se sabe que su masa molar está comprendida entre 50 y 60 g/mol.

La combustión del hidrocarburo se puede expresar como:



Todo el carbono del CO_2 y el hidrógeno del H_2O provienen del hidrocarburo; por tanto:

$$8,8 \text{ g CO}_2 \cdot \frac{12 \text{ g C}}{44 \text{ g CO}_2} = 2,4 \text{ g C}$$

$$3,6 \text{ g H}_2\text{O} \cdot \frac{2 \text{ g H}}{18 \text{ g H}_2\text{O}} = 0,4 \text{ g H}$$

A partir de estos datos:

$$2,4 \text{ g C} \cdot \frac{1 \text{ mol C}}{12 \text{ g C}} = 0,2 \text{ moles C}$$

$$0,4 \text{ g H} \cdot \frac{1 \text{ mol H}}{2 \text{ g H}} = 0,4 \text{ moles H}$$

Dividiendo entre 0,2, se comprueba que la fórmula empírica es CH_2 .

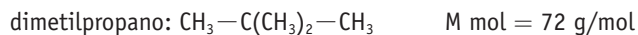
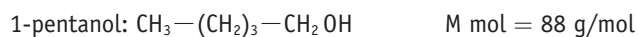
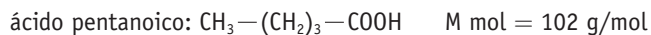
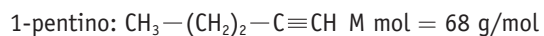
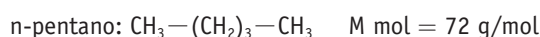
Como la fórmula molecular es n veces la masa de la fórmula empírica, el valor de n más aproximado es $n = 4$. Por tanto, la fórmula molecular será: C_4H_8 .

6. Explica la influencia de las fuerzas intermoleculares sobre los puntos de ebullición de los compuestos orgánicos y ordena de forma razonada, de mayor a menor punto de ebullición, los siguientes compuestos: pentano, 1-pentino, ácido pentanoico, dimetilpropano y 1-pentanol.

Las fuerzas intermoleculares son interacciones atractivas que tienden a mantener unidas las moléculas de un compuesto; por tanto, cuanto mayor sean estas, más probabilidad hay de que esa sustancia se encuentre en estado sólido, o líquido, a temperatura ambiente.

Las interacciones más intensas son los puentes de hidrógeno y luego las fuerzas de Van der Waals; en general, cuánto más polar sea una molécula o de mayor masa, más intensas serán las fuerzas intermoleculares.

En este caso tenemos:



Teniendo en cuenta la polaridad del grupo funcional y el valor de las masas moleculares, tendríamos:

	Ácido pentanoico	> 1-pentanol	> 1-pentino	> pentano	> dimetilpropano
Tª ebullición (°C)	(186)	(138)	(48)	(36)	(10)

7. Justifica que:

- Los alcoholes se disuelven mejor en agua que las cetonas de igual número de carbonos.
- Las aminas terciarias poseen puntos de ebullición inferiores a las primarias de similar masa molecular.

c) El ácido etanoico se disuelve mejor en agua que el ácido decanoico.

d) El metanoato de metilo tiene una temperatura de ebullición inferior al ácido etanoico, siendo sus masas molares iguales.

e) Los hidrocarburos lineales tienen mayor temperatura de ebullición que los ramificados.

a) Sí; ya que el grupo OH de los alcoholes es más polar que el grupo carbonilo CO, de las cetonas.

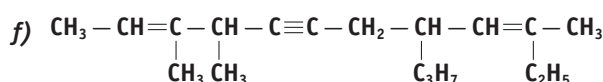
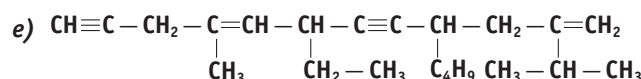
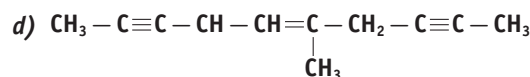
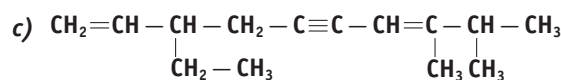
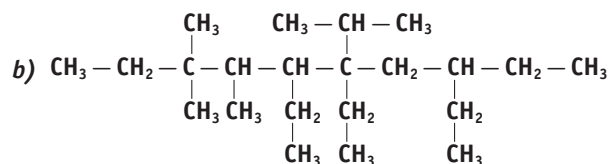
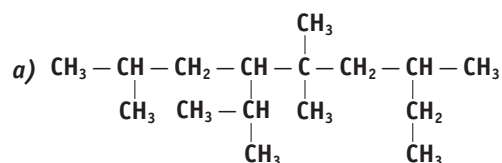
b) Sí; ya que al desaparecer el enlace NH en las aminas terciarias, la molécula pierde polaridad. Así, por ejemplo, el punto de ebullición de la trimetilamina (M mol = 59) es 3,5 °C, mientras que el de la propanamina (M mol = 59) es 48,7 °C y el de la 1,2-etanodiamina (M mol = 60) es 116,5 °C.

c) Sí; porque al aumentar la cadena carbonada, básicamente hidrófoba, disminuye la solubilidad en agua del compuesto.

d) Por la polaridad de la molécula que facilita las interacciones moleculares. El ácido acético puede formar puentes de hidrógeno; en cambio el éster no.

e) Sí; ya que los hidrocarburos ramificados tienen menos superficie de contacto con respecto a las moléculas lineales, lo que limita las interacciones de Van der Waals.

8. Nombra los siguientes hidrocarburos:

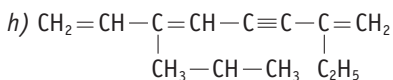
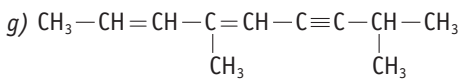
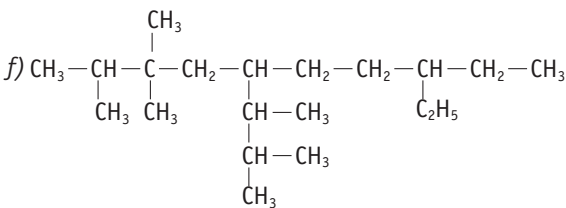
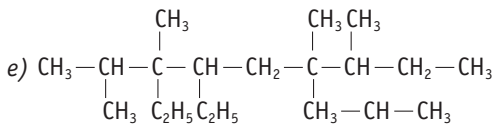
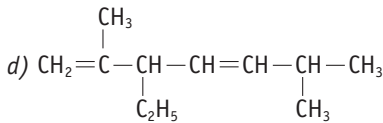
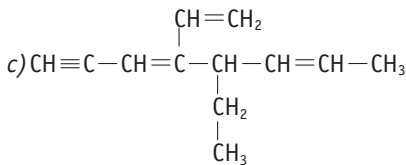
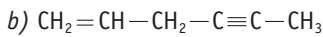
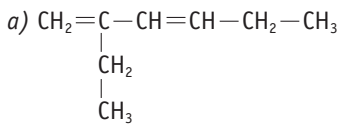


- 4-isopropil-2,5,5,7-tetrametilnonano
- 5,6,8-trietil-6-isopropil-3,3,4-trimetildecano
- 3-etil-8,9-dimetil-1,7-decadien-5-ino
- 5-metil-5-decaen-2,8-diino
- 9-butil-6-etil-11-isopropil-4-metil-4,11-dodecadien-1,7-diino
- 3,4,10-trimetil-8-propil-2,9-dodecadien-5-ino

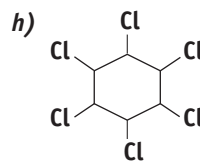
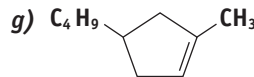
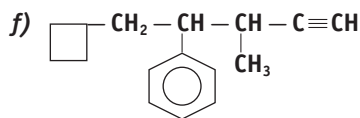
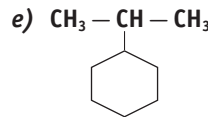
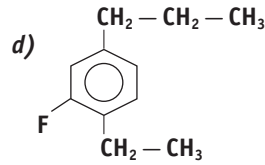
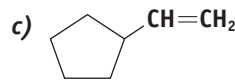
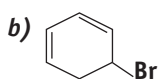
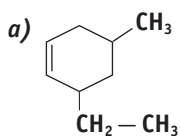


9. Formula los siguientes hidrocarburos:

- a) 2-etilhexa-1,3-dieno (R-93 IUPAC)
- b) hex-1-en-4-ino (R-93 IUPAC)
- c) 4-etenil-5-etilocta-3,6-dien-1-ino (R-93 IUPAC)
- d) 3-etil-2,6-dimetilhepta-1,4-dieno (R-93 IUPAC)
- e) 3,4-dietil-6-isopropil-2,3,6,7-tetrametilnonano
- f) 5-(1,2-dimetilpropil)-8-etil-2,3,3-trimetildecano
- g) 4,8-dimetil-2,4-nonadien-6-ino
- h) 7-etil-3-isopropil-1,3,7-octatrien-5-ino



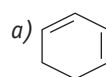
10. Nombra los siguientes compuestos:

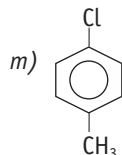
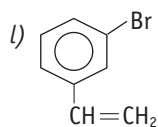
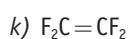
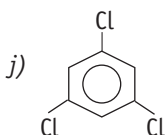
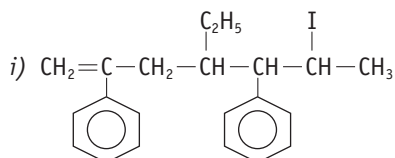
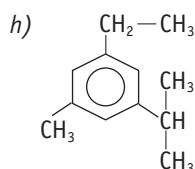
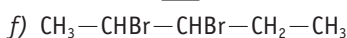
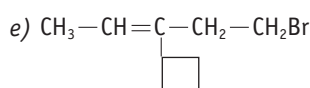
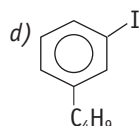
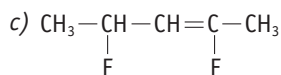
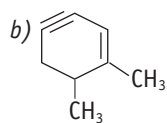


- a) 3-etil-5-metilciclohexeno
- b) 5-bromo-1,3-ciclohexadieno
- c) ciclopentileno (etenilciclopentano)
- d) 1-etil-2-flúor-4-propilbenceno
- e) isopropilciclohexano (2-ciclohexilpropano)
- f) 5-ciclobutil-4-fenil-3-metil-1-pentino
- g) 4-butil-1-metilciclopenteno
- h) 1,2,3,4,5,6-hexaclorociclohexano

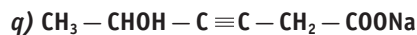
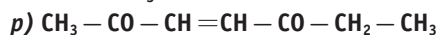
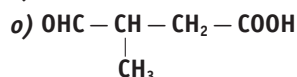
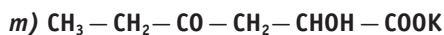
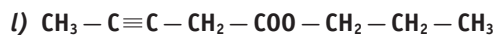
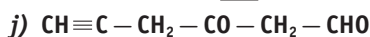
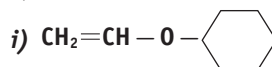
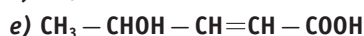
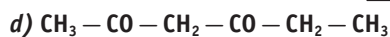
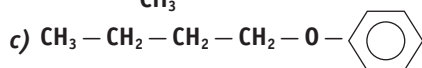
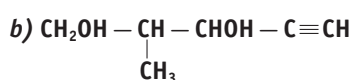
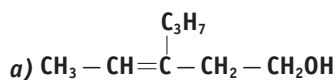
11. Formula los siguientes compuestos:

- a) ciclohexa-1,3-dieno (R-93 IUPAC)
- b) 1,6-dimetilciclohex-1-en-3-ino (R-93 IUPAC)
- c) 2,4-difluorpent-2-eno (R-93 IUPAC)
- d) m-butilyodobenceno
- e) 5-bromo-3-ciclobutilpent-2-eno (R-93 IUPAC)
- f) 2,3-dibromopentano
- g) tetracloruro de carbono
- h) 1-etil-3-isopropil-5-metilbenceno
- i) 4-etil-2,5-difenil-6-yodo-1-hepteno
- j) 1,3,5-triclorobenceno
- k) tetrafluoreteno
- l) 1-bromo-3-etinilbenceno
- m) p-clorotolueno





12. Nombra los siguientes compuestos:



a) 3-propil-3-penten-1-ol

b) 2-metil-4-pentin-1,3-diol

c) butilfeniléter (butiloxibenceno)

d) 2,4-hexanodiona

e) ácido 4-hidroxi-2-pentenoico

f) metanoato de metilo

g) 2,6-heptadien-1,4-diol

h) 3-cloro-1,4-dihidroxi-2-pentanona

i) etenilciclohexiléter (ciclohexiloxieteno)

j) 3-oxo-5-hexinal

k) ácido 2-nonenodioico

l) 3-pentinoato de propilo

m) 2-hidroxi-4-oxo-hexanoato de potasio

n) benzoato de metilo

ñ) 3-pentenoato de etenilo

o) ácido 3-formilbutanoico (ácido 3-oxobutanoico)

p) 3-hepten-2,5-diona

q) 5-hidroxi-3-hexinoato de sodio

13. Formula los siguientes compuestos:

a) 3-etilhex-4-en-1-ol (R-93 IUPAC)

b) 2-butylhexa-1,5-diol (R-93 IUPAC)

c) 2,4,6-triclorofenol

d) dieteniléter

e) 4-hidroxi-2-butenoal (R-93 IUPAC)

f) 4-metilhex-1-en-3-ona (R-93 IUPAC)

g) ácido 4-clorobenzoico (R-93 IUPAC)

h) but-2-enoato de etilo (R-93 IUPAC)

i) 5-propil-3-heptin-1,6-diol

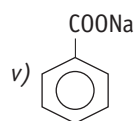
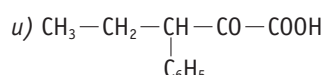
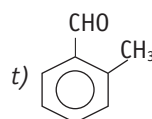
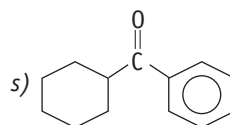
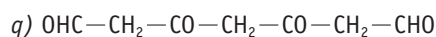
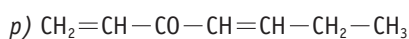
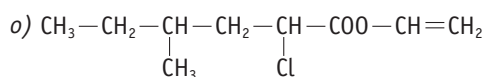
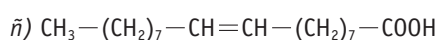
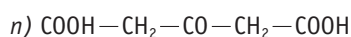
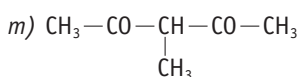
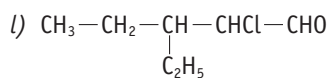
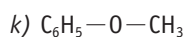
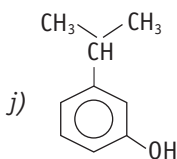
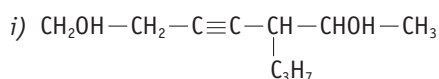
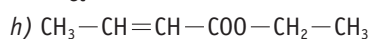
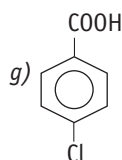
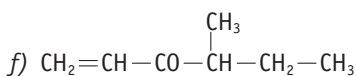
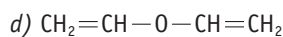
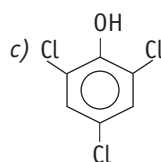
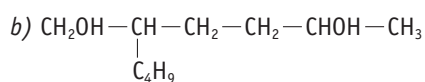
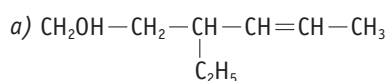
j) 3-isopropilfenol

k) fenilmetiléter (anisol)

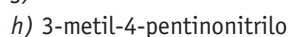
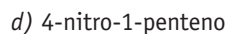
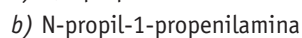
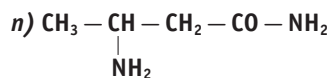
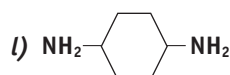
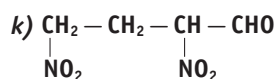
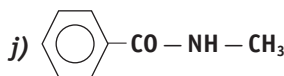
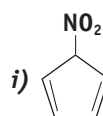
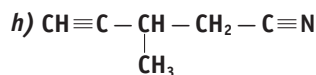
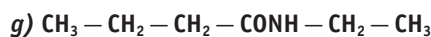
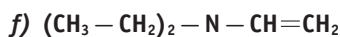
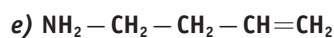
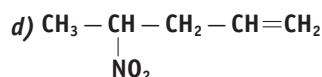
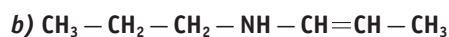
l) 2-cloro-3-etilpentanal

m) 3-metil-2,4-pentanodiona

- n) ácido 3-oxopentanoico
 ñ) ácido 9-octadecenoico (ácido oleico)
 o) 2-cloro-4-metilhexanoato de etenilo
 p) 1,4-heptadien-3-ona
 q) 3,5-dioxoheptanodial
 r) propanoato de calcio
 s) ciclohexilfenilcetona
 t) 2-metilbenzaldehído
 u) ácido 3-fenil-2-oxopentanoico
 v) benzoato de sodio



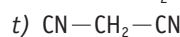
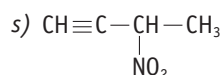
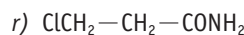
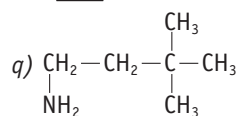
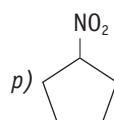
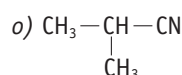
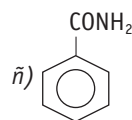
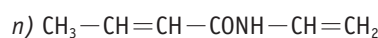
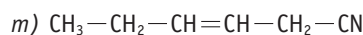
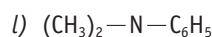
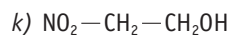
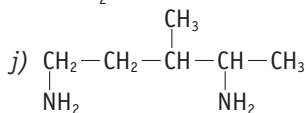
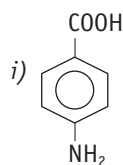
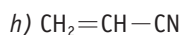
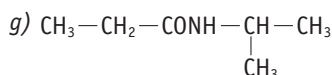
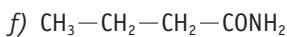
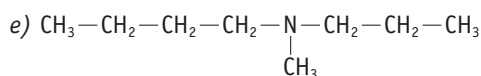
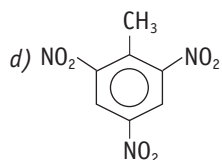
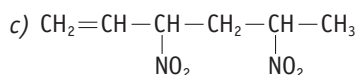
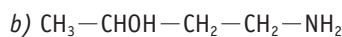
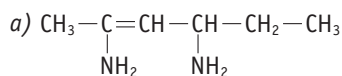
14. Nombra los siguientes compuestos:



- i) 5-nitro-1,3-ciclopentadieno
 j) N-metilbenzamida
 k) 2,4-dinitrobutanal
 l) 1,4-ciclohexanodiamina
 m) 3-hidroxi-4-pentinonitrilo
 n) 3-aminobutanamida

15. Formula los siguientes compuestos:

- a) hex-2-en-2,4-diamina (R-93 IUPAC)
 b) 4-aminobutano-2-ol (R-93 IUPAC)
 c) 3,5-dinitrohex-1-eno (R-93 IUPAC)
 d) 2,4,6-trinitrotolueno
 e) N-metil-N-propilbutilamina
 f) butanamida
 g) N-isopropilpropanamida
 h) propenonitrilo
 i) ácido p-aminobenzoico
 j) 3-metil-1,4-pentanodiamina
 k) 2-nitroetanol
 l) N,N-dimetilfenilamina
 m) 3-hexenonitrilo
 n) N-etenil-2-butenamida
 ñ) benzamida
 o) 2-metilpropanonitrilo
 p) nitrociclopentano
 q) 3,3-dimetil-1-butanamina
 r) 3-cloropropanamida
 s) 3-nitro-1-butino
 t) propanodinitrilo
 u) N-metilmetamida



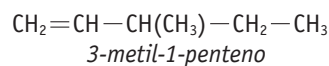
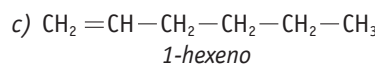
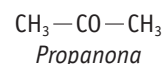
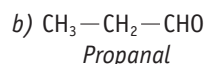
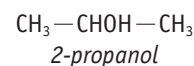
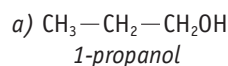
16. Escribe y nombra:

PAU

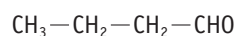
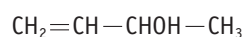
a) Dos isómeros de posición de fórmula $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$.

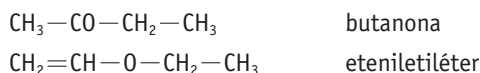
b) Dos isómeros de función de fórmula $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$.

c) Dos isómeros de cadena de fórmula C_6H_{12} .



17. Escribe y nombra cuatro isómeros funcionales del $(\text{C}_4\text{H}_8\text{O})$.





18. Indica qué tipo de isomería estructural pueden presentar los siguientes compuestos:

a) 1-pentino.

b) 2-pentanona.

c) Ciclohexeno.

a) 1-pentino $\Leftrightarrow \text{CH}\equiv\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ serían isómeros suyos:

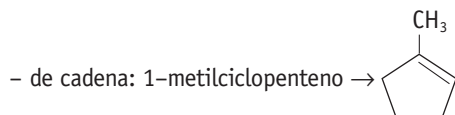
- de posición: 2-pentino $\rightarrow \text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$
- de función: 1,3-pentadieno $\rightarrow \text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3$
- de cadena: 3-metil-1-butino $\rightarrow \text{CH}\equiv\text{C}-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CH}_3$

b) 2-pentanona $\Leftrightarrow \text{CH}_3-\text{CO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$

- de posición: 3-pentanona $\rightarrow \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$
- de función: pentanal $\rightarrow \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CHO}$
- de cadena: 3-metil-2-butanona $\rightarrow \text{CH}_3-\text{CO}-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CH}_3$

c) ciclohexeno $\Leftrightarrow (\text{C}_6\text{H}_{10})$

- de función: 2-hexino $\rightarrow \text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$



19. ¿Qué se entiende por «carbono asimétrico»? Señala los carbonos asimétricos del:

a) 2,3-diclorobutano: $\text{CH}_3-\text{CHCl}-\text{CHCl}-\text{CH}_3$

b) 2-propanol: $\text{CH}_3-\text{CHOH}-\text{CH}_3$

c) 1,1-dibromo-2-butanona: $\text{Br}_2\text{CH}-\text{CO}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$

d) 4-amino-2-pentanol: $\text{CH}_3-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{CH}_2-\text{CHOH}-\text{CH}_3$

Se denomina carbono asimétrico o estereogénico al carbono que tiene los 4 sustituyentes diferentes. Habitualmente se simbolizan con un asterisco.

Según ese criterio:

a) 2,3-diclorobutano $\Leftrightarrow \text{CH}_3-\text{*CHCl}-\text{*CHCl}-\text{CH}_3$

Los carbonos C-2 y C-3 son asimétricos.

b) 2-propanol $\Leftrightarrow \text{CH}_3-\text{CHOH}-\text{CH}_3$

No tiene carbonos asimétricos.

c) 1,1-dibromo-2-butanona $\Leftrightarrow \text{CH}(\text{Br})_2-\text{CO}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$

No tiene carbonos asimétricos.

d) 4-amino-2-pentanol $\Leftrightarrow \text{CH}_3-\text{*CH}(\text{NH}_2)-\text{CH}_2-\text{*CHOH}-\text{CH}_3$

Los carbonos C-2 y C-4 son asimétricos.

20. Define los distintos tipos de isomería espacial y razona qué clase de isómeros tendrán los siguientes compuestos, formulándolos adecuadamente:

a) 2-cloropentano

b) 2-metil-2-penteno

c) 2-propanamina

d) 3,4-dimetil-3-hexeno

La isomería espacial la presentan aquellos compuestos que se diferencian en la disposición espacial de sus átomos en la molécula.

Puede ser geométrica o *cis-trans* y óptica o estereoisomería.

En estos casos:

a) 2-cloropentano $\Leftrightarrow \text{CH}_3-\text{*CHCl}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$

Óptica, ya que el C-2 es asimétrico y, por tanto, hay 2 enantiómeros.



b) 2-metil-2-penteno $\Leftrightarrow \text{CH}_3-\text{C}(\text{CH}_3)=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$

No tiene isómeros ópticos, porque no hay carbonos asimétricos, ni isómeros geométricos, ya que los dos sustituyentes del C-2 alquénico son iguales.

c) 2-propanamina $\Leftrightarrow \text{CH}_3-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{CH}_3$

No tiene isómeros espaciales, ya que no tiene dobles enlaces ni carbonos asimétricos.

d) 3,4-dimetil-3-hexeno $\Leftrightarrow \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{C}(\text{CH}_3)=\text{C}(\text{CH}_3)-\text{CH}_2-\text{CH}_3$

Tendría isomería geométrica, ya que tiene dos isómeros *cis-trans*:

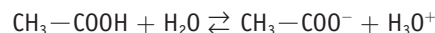


Como no tiene carbonos asimétricos, no tendrá isómeros ópticos.

21. La constante de disociación del ácido acético es $K_a = 1,8 \cdot 10^{-5}$ y la del ácido cloroacético es $K_a = 1,4 \cdot 10^{-3}$. Justifica la diferencia en esos valores a partir del efecto inductivo.

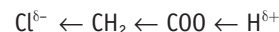
El efecto inductivo consiste en el desplazamiento parcial del par electrónico de un enlace sencillo hacia el átomo más electronegativo de los dos que forman el enlace. Este desplazamiento electrónico afecta en mayor o menor medida a los enlaces próximos.

El ácido acético (ácido etanoico) es un ácido débil:



y el equilibrio está muy poco desplazado hacia la derecha.

En el ácido cloroacético el efecto inductivo -I del cloro hace que el enlace C-Cl esté desplazado hacia el cloro, lo que genera una ligera carga positiva en el carbono que, a su vez, provoca una distorsión en los enlaces adyacentes, por lo que el H terminal queda menos unido al O, y por tanto puede cederse con mayor facilidad. Esquemáticamente:



22. a) Escribe las fórmulas semidesarrolladas de los siguientes compuestos:

I) 2,3-dimetilbutano

III) ácido etanoico

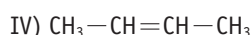
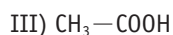
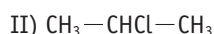
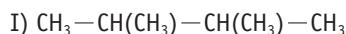
II) 2-cloropropano

IV) 2-buteno

b) En cada una de ellas, indica razonadamente si existe algún enlace polar en el que intervenga el carbono y en qué sentido se produce el desplazamiento del par electrónico.

c) De las moléculas I), II) y IV), escribe algún isómero, nómbralo e indica el tipo con respecto al inicial.

a) Las fórmulas que nos piden son:



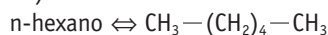
b) - En I) no hay ningún enlace polar.

- En II) hay un enlace polar C—Cl con desplazamiento electrónico hacia el átomo de cloro.

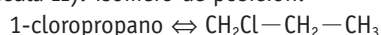
- En III) hay dos enlaces polares: el doble enlace C=O, con el par electrónico pi desplazado hacia el oxígeno; y el enlace sencillo C—OH, también desplazado hacia el oxígeno.

- En IV) no hay ningún enlace polar.

c) - De la molécula I): isómero de cadena:



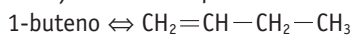
- De la molécula II): isómero de posición:



- De la molécula III): isómero de función:

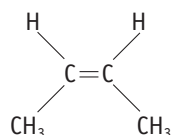


- De la molécula IV): isómero de posición

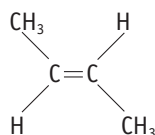


Isómero de función: Ciclobutano \Leftrightarrow 

Isómero *cis-trans*:



Isómero *cis*



Isómero *trans*

23. ¿Qué se entiende por intermedio de reacción? Explica por qué los radicales libres, los carbocationes y los carbaniones se consideran intermedios de reacción.

Los intermedios de reacción son especies químicas, habitualmente muy inestables, que se forman en el transcurso de las reacciones químicas y cuya estructura es una mezcla de los reactivos que desaparecen y los productos que se forman. Al tener una vida media muy efímera son difíciles de aislar.

En las reacciones orgánicas, los tres tipos fundamentales de intermedios de reacción son:

- Sustancias con un carbocatión, que es un carbono al que le falta un electrón, y por tanto tiene carga eléctrica positiva.

- Sustancias con un carbanión, que es un átomo de carbono con un electrón de más, y por tanto con carga eléctrica negativa.

- Sustancias denominadas radicales libres, que se caracterizan por tener un electrón desapareado.

24. Explica qué se entiende por reactivos electrófilos y nucleófilos y clasifica las siguientes especies químicas según dicho criterio: $\text{CH}_3-\text{CH}_2\text{OH}$; BCl_3 ; NaOH ; KCN ; F^- ; CH_3-NH_2 ; H^+ ; H_2O ; CH_3-COONa ; NH_4Cl .

Los reactivos electrófilos son especies químicas con deficiencia electrónica y/o con orbitales vacíos; por eso tienen tendencia a atacar zonas de alta densidad electrónica.

Los reactivos nucleófilos tienen uno o más pares de electrones sin compartir, y por tanto tienden a cederlos en zonas del sustrato con deficiencia electrónica.

Según eso, actuarían como:

- Reactivos electrófilos: H^+ ; BCl_3 ; NH_4Cl .

- Reactivos nucleófilos: $\text{CH}_3-\text{CH}_2\text{OH}$; NaOH ; KCN ; F^- ; CH_3-NH_2 ; H_2O ; CH_3-COONa .

25. Basándote en los conceptos de reactivo electrófilo y nucleófilo, razona cuál de ellos reaccionaría con las siguientes sustancias: propeno, etanal, benceno, 1-cloropropano.

Teniendo en cuenta los criterios del ejercicio anterior:

a) Propeno: $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_3$

Un reactivo electrófilo atacaría la insaturación C=C.

b) Etanal: $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{O}$

Un reactivo nucleófilo atacaría el doble enlace C=O, ya que el carbono tiene una ligera carga positiva.

c) Benceno.

Un reactivo electrófilo atacaría las insaturaciones C=C.

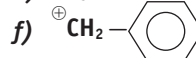
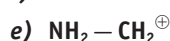
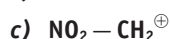
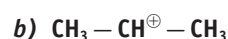
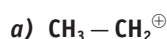
d) 1-cloropropano: $\text{ClCH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$

Un reactivo nucleófilo atacaría el C-1, ya que está cargado positivamente debido al efecto $-I$ del átomo de cloro.

26. Justifica el carácter ácido-base de Lewis de los reactivos electrófilos y nucleófilos.

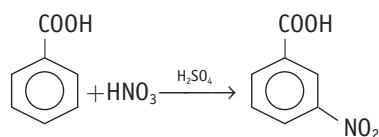
En general, todo reactivo electrófilo actúa como ácido de Lewis y todo reactivo nucleófilo como una base de Lewis. Sin embargo, el concepto de reactivo es más bien cinético, e indica qué tipo de reacción es más probable que se pueda dar; por el contrario, el concepto de ácido-base de Lewis es un concepto más estructural, basado sobre todo en las características internas de esas sustancias y la posibilidad de que puedan formar enlaces covalentes dativos.

27. Ordena los siguientes carbocationes por orden decreciente de estabilidad:

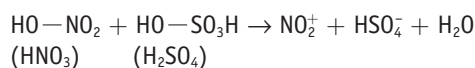


La estabilidad de un carbocatión depende de la facilidad con la que se amortigüe la distorsión electrónica generada por la carga positiva del carbono (C^+). Por eso, la estabilidad se favorece cuando los grupos contiguos al carbocatión tienen efecto $+I$ o $+M$, ya que «ceden» carga electrónica al carbocatión ayudando a su estabilidad y, por tanto, a su mayor perdurabilidad.

tanto, la nitración del ácido benzoico será más lenta y estará orientada básicamente hacia posiciones *meta*.

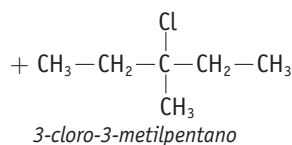
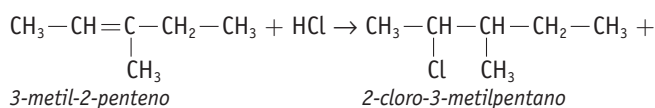


d) Se utiliza H_2SO_4 como catalizador, ya que actúa sobre el HNO_3 para formar el grupo NO_2^+ , que es un fuerte reactivo electrófilo atacante:



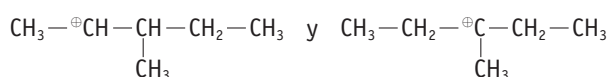
32. Al reaccionar el 3-metil-2-penteno (3-metilpent-2-eno) con ácido clorhídrico se forman dos derivados clorados. Escribe la ecuación de la reacción y justifica cuál de ellos será mayoritario. ¿Qué regla has aplicado?

La reacción que tiene lugar se puede expresar como:



Aplicando la regla empírica de Markownikoff, el producto más abundante será el 3-cloro-3-metilpentano, ya que el hidrógeno se incorpora al carbono que más hidrógenos tiene.

Su justificación teórica se basa en la diferente estabilidad de los dos carbocationes que se pueden formar tras la ruptura del doble enlace y la adición del H^+ proveniente del ácido clorhídrico:



El segundo carbocatión es más estable (carbocatión terciario) por el efecto +I de los grupos alquilo; por tanto, habrá más probabilidad de que el reactivo nucleófilo Cl^- se una a ese carbocatión.

33. Escribe la fórmula semidesarrollada de los siguientes compuestos:

a) 3-metil-1-clorobutano

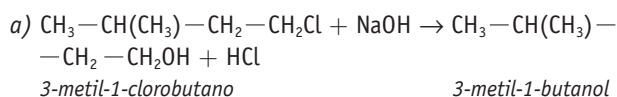
b) 3-metil-1-pentino

c) metil-2-propanol

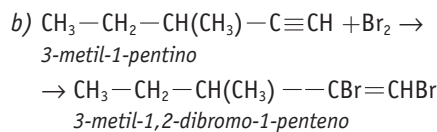
d) 2,4-pentanodiona

Escribe un ejemplo de sustitución, de adición nucleófila y de adición electrófila en los que intervenga alguno de ellos.

Los compuestos que nos piden, con la reacción correspondiente, serían:

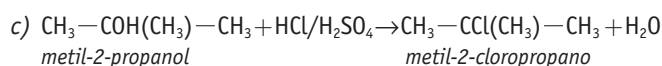
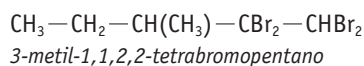


Es una reacción de sustitución nucleófila.

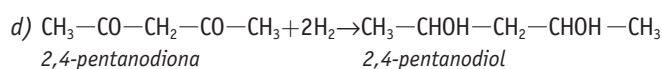


Es una reacción de adición electrófila al triple enlace.

Si hubiera bromo en exceso, se formaría el correspondiente derivado bromado saturado:



Es una reacción de sustitución nucleófila.



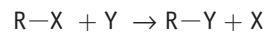
Es una reacción de adición nucleófila y de reducción (como luego se verá).

34. a) Describe brevemente las características generales de las reacciones de sustitución, adición y eliminación.

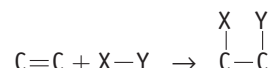
b) Escribe un ejemplo de cada uno de los siguientes tipos de reacciones orgánicas: adición radicalica; sustitución nucleófila; sustitución electrófila; deshidratación de alcoholes.

a) De forma resumida:

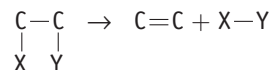
Sustitución: Llamadas también de desplazamiento; se producen cuando un átomo o grupo atómico del reactivo atacante sustituye (desplaza) a un átomo o grupo atómico del sustrato. Esquemáticamente:



Adición: Se produce cuando se rompe una instauración del sustrato y se unen nuevos átomos o grupos atómicos a los átomos que formaban el enlace múltiple inicial; este proceso se realiza sin que haya salida de átomos del sustrato. Esquemáticamente:



Eliminación: Equivale a la reacción contraria a la adición, ya que se forma un enlace múltiple en el sustrato por la salida de dos átomos o grupos atómicos situados en carbonos contiguos. Esquemáticamente:



b) Ejemplos característicos serían:

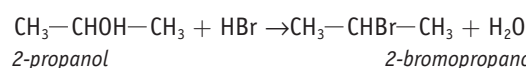
– Adición radicalica:



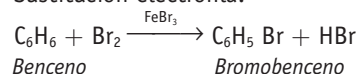
Eteno

Polieteno (polietileno)

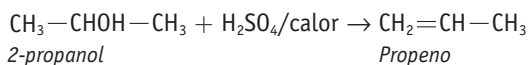
– Sustitución nucleófila:



– Sustitución electrófila:

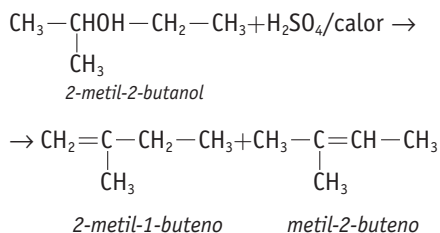


– Deshidratación de alcoholes:



35. La deshidratación del 2-metil-2-butanol con ácido sulfúrico produce una mezcla de alquenos en diferente proporción. Escribe los posibles alquenos que se forman y justifica cuál estará en mayor proporción.

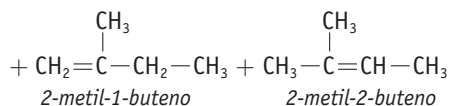
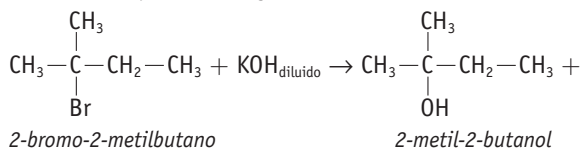
La reacción que tiene lugar es:



Siguiendo la regla de Saytzeff, se formará mayoritariamente el metil-2-buteno, ya que el hidrógeno que se elimina del carbono adyacente al carbocatión (el C-2, que sustenta el grupo OH), proviene del carbono que menos hidrógenos tiene, que en este caso es el C-3.

36. ¿Qué productos se obtendrán al reaccionar el 2-bromo-2-metilbutano con una disolución diluida de hidróxido potásico? ¿A qué se debe esa mezcla de productos?

La reacción que tiene lugar es:



Durante la reacción se puede dar un proceso de sustitución nucleófila con la formación del correspondiente alcohol; o un proceso de eliminación con la formación de dos alquenos isómeros.

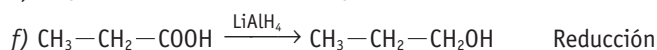
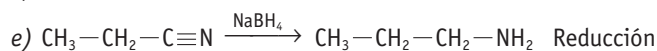
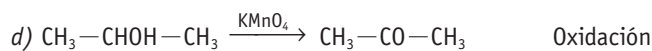
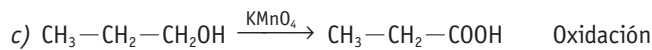
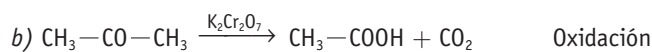
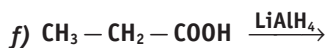
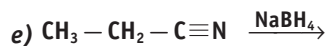
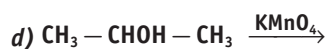
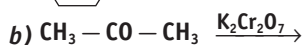
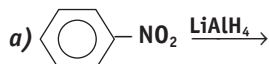
Si el reactivo es débil (H_2O) y con disolventes polares, compiten la $\text{S}_{\text{N}}1$ y la $\text{E}_{1\text{r}}$, siendo mayoritaria la $\text{S}_{\text{N}}1$.

Si el reactivo es más fuerte (OH^-) y el disolvente menos polar (acetona), se favorece el mecanismo E_2 de forma casi excluyente.

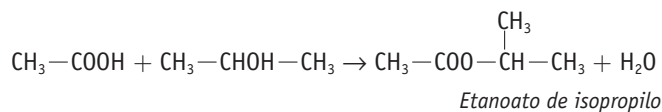
En este caso, podemos suponer una mezcla de ambas reacciones, ya que hay un reactivo nucleófilo fuerte pero con poca concentración (lo que desfavorece la E_2) y un disolvente polar (lo que favorece la $\text{S}_{\text{N}}1$).

De los dos alquenos, y siguiendo la Regla de Saytzeff, el mayoritario sería el 2-metil-2-buteno.

37. Completa las siguientes ecuaciones de reacciones redox:



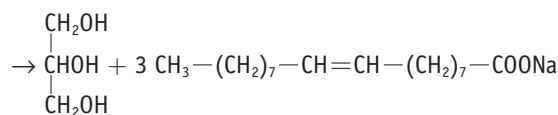
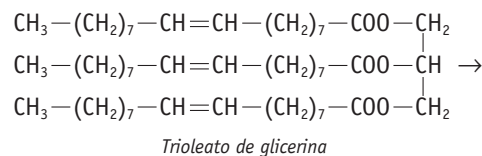
38. Escribe la ecuación correspondiente a la reacción en medio ácido entre el ácido etanoico y el 2-propanol. Especifica de dónde se obtiene la molécula de agua.



La molécula de agua se obtiene de la unión del grupo OH del ácido con el H del grupo OH del alcohol.

39. Escribe la reacción de saponificación del trioleato de glicerina. Justifica la acción limpiadora del producto que se forma.

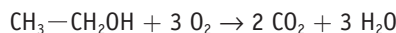
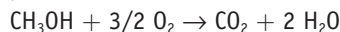
La reacción de saponificación sería:



Cuando se agita un jabón en el agua se crea una dispersión coloidal en la que las moléculas de jabón forman unos agregados denominados micelas, de manera que las cadenas carbonadas (lipofílicas) se dirigen hacia el centro de las micelas y las cabezas polares (hidrofílicas) se quedan en la superficie, que permanece en contacto con el agua. Estas micelas rodean las gotas de aceite o grasa, quedando atrapadas en el interior de la micela, ya que las colas lipofílicas del jabón se adhieren a la gota de aceite y los extremos hidrofílicos mantienen su contacto con el agua. Cuando se elimina el agua sucia, con ella se están eliminando las gotas de aceite o grasa emulsionadas en su seno.

40. Determina la composición de una mezcla de metanol y etanol si la combustión de 4,45 g de la misma ha producido 7,63 g de CO₂.

Las ecuaciones de la combustión del metanol y etanol son respectivamente:



Llamando x a los gramos de metanol e y a los gramos de etanol, y teniendo en cuenta la estequiometría de las reacciones de combustión, se puede determinar cuántos gramos de CO₂ provienen de cada uno de los dos alcoholes:

$$x \text{ g metanol} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{32 \text{ g}} \cdot \frac{44 \text{ g CO}_2}{\text{mol metanol}} = 1,38 x \text{ g CO}_2 \text{ provienen del metanol}$$

$$y \text{ g etanol} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{46 \text{ g}} \cdot \frac{88 \text{ g CO}_2}{\text{mol metanol}} = 1,91 y \text{ g CO}_2 \text{ provienen del etanol}$$

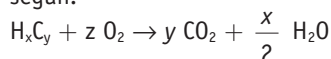
Con esos datos se puede establecer el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} x + y &= 4,45 \\ 1,38x + 1,91y &= 7,63 \end{aligned}$$

Resolviendo el sistema, se comprueba que la mezcla está formada por 1,64 g de metanol y 2,81 g de etanol.

41. En la combustión de 5,132 g de un hidrocarburo de masa molecular de 78 u, se producen 17,347 g de CO₂ y 3,556 g de H₂O. Formula y nombra el hidrocarburo.

La reacción de combustión del hidrocarburo se puede expresar según:



Como todo el carbono del CO₂ proviene del hidrocarburo:

$$17,347 \text{ g CO}_2 \cdot \frac{12 \text{ g C}}{44 \text{ g CO}_2} = 4,731 \text{ g C}$$

Y, por tanto, el hidrocarburo tenía: $5,132 - 4,731 = 0,401 \text{ g}$ de hidrógeno.

A partir de estos valores:

$$4,731 \text{ g C} \cdot \frac{1 \text{ mol C}}{12 \text{ g C}} = 0,394 \text{ moles C}$$

$$0,401 \text{ g H} \cdot \frac{1 \text{ mol H}}{1 \text{ g H}} = 0,401 \text{ moles H}$$

La fórmula empírica será: CH

La fórmula molecular es n veces la fórmula empírica; en este caso: $n = \frac{78}{13}$; $n = 6$.

La fórmula molecular del hidrocarburo es C₆H₆, que previsiblemente se refiere al benceno, pero que también podría ser:



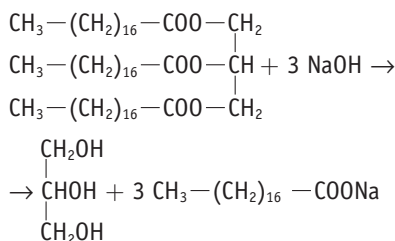
- etenil-ciclobutadieno: 

- 1,5-hexadiino: CH≡C-CH₂-CH₂-C≡CH (y sus isómeros de posición)

- 1,5-hexadien-3-ino: CH₂=CH-C≡C-CH=CH₂

42. Calcula los gramos de NaOH del 80 % de pureza que se necesitan para saponificar 1 kg de triestearato de glicerina.

La reacción de saponificación se puede expresar como:



Como la M. mol del triestearato de glicerina es 890 g/mol y la del hidróxido sódico es 40 g/mol, se pueden establecer las siguientes relaciones estequiométricas:

$$1000 \text{ g triestearato} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{890 \text{ g}} \cdot \frac{120 \text{ g NaOH}}{\text{mol triestearato}} \cdot \frac{100}{80} = 168,5 \text{ g de NaOH comercial se necesitan.}$$

43. A partir del 1-propanol, escribe la reacción o las reacciones que permiten la obtención de:

- | | |
|-------------------------|----------------------|
| a) 1-cloropropano. | b) Propeno. |
| c) Propanal. | d) Propano. |
| e) Etanoato de propilo. | f) Ácido propanoico. |
| g) 2-bromopropano. | h) Dipropiléter. |
| i) Butanonitrilo. | j) Metilpropiléter. |

Las ecuaciones correspondientes a los procesos de síntesis que nos piden serían:

- a) $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} + \text{HCl} \rightarrow \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{Cl} + \text{H}_2\text{O}$
(Sustitución nucleófila)
- b) $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2\text{SO}_4 \xrightarrow{\text{calor}} \text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}_2 + \text{H}_2\text{O}$
(Eliminación)
- c) $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} \xrightarrow{\text{KMnO}_4 \text{ (diluído)}} \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CHO}$
(Oxidación)
- d) $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} \xrightarrow{\text{H}^+/\text{calor}} \text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}_2$
 $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_3$
(Eliminación + Adición electrofílica)
- e) $\text{CH}_3-\text{COOH} + \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} \xrightarrow{\text{H}^+} \text{CH}_3-\text{COO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$
(Esterificación)
- f) $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} \xrightarrow{\text{KMnO}_4 \text{ (concentrado)}} \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{COOH}$
(Oxidación)
- g) $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2\text{SO}_4 \xrightarrow{\text{calor}} \text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}_2$
 $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}_2 + \text{HBr} \rightarrow \text{CH}_3-\text{CHBr}-\text{CH}_3$
(Eliminación + Adición electrofílica)
- h) $2 \text{ CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2\text{SO}_4 \text{ (dil)/}80^\circ\text{C} \rightarrow$
 $\rightarrow \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$
(Eliminación)
- i) $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} + \text{HCl} \rightarrow \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{Cl}$
 $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{Cl} + \text{KCN} \rightarrow \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CN}$
(Sustitución nucleófila)
- j) $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} + \text{ICH}_3 \rightarrow \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_3$
(Sustitución nucleófila)

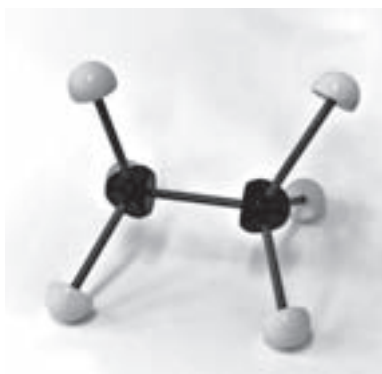
Cuestiones y problemas

1. A partir de la hibridación del átomo de carbono, justifica la geometría del etano, el eteno y el etino. Dibuja estas moléculas según un esquema de bolas y varillas.

Aunque se explica con más detenimiento en la Unidad 2, la Teoría de la Hibridación de Orbitales Atómicos surge para justificar los datos experimentales que se conocían de las longitudes y los ángulos de enlace de moléculas relativamente sencillas; para ello, considera que los orbitales atómicos pueden combinarse entre sí dando lugar a otros nuevos, denominados híbridos, de modo que en los posteriores enlaces se favorezca el máximo solapamiento y se minimice el nivel energético del mismo.

Según eso, las hibridaciones que explicarían la geometría molecular específica del etano, eteno y etino serían:

– Etano: $\text{CH}_3\text{—CH}_3$



En cada carbono hay una combinación del orbital s y los tres orbitales p para formar 4 orbitales híbridos sp^3 , equivalentes entre sí, y orientados hacia los vértices de un tetraedro.

Los dos carbonos se unen entre sí mediante un enlace sencillo sigma y cada carbono se une a 3 átomos de hidrógeno,

también mediante enlaces sencillos sigma. La geometría molecular sería similar a dos tetraedros unidos entre sí por uno de sus vértices.

– Eteno: $\text{CH}_2=\text{CH}_2$



La combinación del orbital s del carbono y 2 orbitales p formarían 3 orbitales híbridos sp^2 , equivalentes, coplanares y con ángulos de 120° entre sí; el otro orbital p se mantendría puro, sin hibridar, y perpendicular al plano que forman los tres orbitales híbridos.

Los dos carbonos están unidos entre sí, y a 2 hidrógenos cada uno, mediante enlace sencillo sigma; además, se formaría otro enlace pi intercarbónico por solapamiento lateral de los orbitales p sin hibridar.

– Etino: $\text{CH}\equiv\text{CH}$

La combinación del orbital s y de un orbital p del carbono da lugar a dos orbitales híbridos sp , que se sitúan alineados, con ángulos entre sí de 180° ; quedarían otros 2 orbitales p , puros, sin hibridar, perpendiculares entre sí y con respecto al eje que contiene a los orbitales híbridos.

Cada carbono del etino utiliza sus dos orbitales sp para unirse mediante enlace sigma sencillo con un hidrógeno y con el otro carbono. Los orbitales p servirán para formar 2 enlaces «pi» intercarbónicos: uno por encima y por debajo del enlace sigma anterior y el otro, por delante y por detrás de dicho enlace.

2. Describe la geometría previsible de la molécula de propinal $\text{HC}\equiv\text{C—CHO}$.

La geometría molecular del propinal $\text{H—}^3\text{C}\equiv^2\text{C—}^1\text{CHO}$ se puede explicar a partir de la hibridación de orbitales atómicos.

- El C-1 tiene hibridación sp^2 y, por tanto, estará unido al C-2, al átomo de O y al átomo de H mediante tres enlaces sencillos sigma, coplanares y que forman un ángulo de 120° entre sí.
- El C-2 tiene hibridación sp , y forma dos enlaces sencillos sigma con el C-1 y con el C-3, con ángulo de 180° entre sí.
- El C-3 también tiene hibridación sp , formando dos enlaces sencillos sigma con el hidrógeno y con el C-2, con ángulo de 180° entre sí.

Además, aunque no afecta a la «geometría molecular», se forma un enlace pi entre el C-1 y el O, por encima y por debajo del enlace sigma, y dos enlaces pi entre el C-2 y el C-3 uno por encima y por debajo del enlace sencillo, y otro por delante y por detrás de dicho enlace.

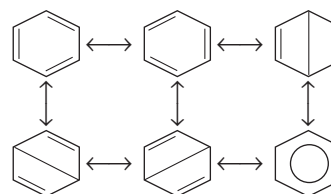
Según eso, la forma de la molécula sería similar a una Y alargada y girada 90° en sentido horario.

3. En el etano, el enlace intercarbónico mide $1,54 \text{ \AA}$; y en el eteno, $1,34 \text{ \AA}$. ¿Por qué en el benceno es de $1,39 \text{ \AA}$?

La molécula de benceno está formada por 6 átomos de carbono con hibridación sp^2 y 6 átomos de hidrógeno que forman un ciclo hexagonal. Cada carbono está unido a otros dos carbonos y a un hidrógeno mediante enlaces sencillos sigma; además, se forman 3 dobles enlaces $\text{C}=\text{C}$ alternos (conjugados).

Los 6 electrones pi que forman estos dobles enlaces no están localizados específicamente, sino distribuidos uniformemente alrededor del anillo, por encima y por debajo del plano de la molécula.

Esta deslocalización de los enlaces pi se representa mediante las llamadas formas de resonancia:



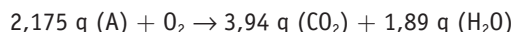
Este carácter resonante de los enlaces carbónicos del benceno es lo que explica que su longitud de enlace ($1,39 \text{ \AA}$) sea intermedia entre el enlace sencillo C—C y el doble $\text{C}=\text{C}$.

4. Un aminoácido contiene carbono, hidrógeno, oxígeno y nitrógeno. En un experimento, la combustión completa de $2,175 \text{ g}$ de ese aminoácido produjo $3,94 \text{ g}$ de CO_2 y $1,89 \text{ g}$ de H_2O . En otro experimento distinto, de $1,873 \text{ g}$ del aminoácido se obtuvieron $0,436 \text{ g}$ de amoníaco. Calcula:

a) La fórmula empírica del aminoácido.

b) Si la masa molecular es aproximadamente de 145 u, ¿cuál es su fórmula molecular?

Si llamamos al aminoácido (A), durante su combustión se han formado:



Como el carbono del CO₂ proviene del aminoácido y el hidrógeno del H₂O también:

$$3,94 \text{ g CO}_2 \cdot \frac{12 \text{ g C}}{44 \text{ g CO}_2} = 1,07 \text{ g C}$$

$$1,89 \text{ g H}_2\text{O} \cdot \frac{2 \text{ g H}}{18 \text{ g H}_2\text{O}} = 0,21 \text{ g H}$$

que lo podemos expresar en forma de porcentaje:

$$\frac{1,07 \text{ g C}}{2,175 \text{ g (A)}} \cdot 100 = 49,4\% \text{ de C}$$

$$\frac{0,21 \text{ g H}}{2,175 \text{ g (A)}} \cdot 100 = 9,65\% \text{ de H}$$

Procediendo de la misma manera con los datos del segundo experimento, tendremos:

$$0,436 \text{ g NH}_3 \cdot \frac{14 \text{ g N}}{17 \text{ g NH}_3} = 0,36 \text{ g N} \rightarrow$$

$$\rightarrow \frac{0,36 \text{ g N}}{1,873 \text{ g (A)}} \cdot 100 = 19,2\% \text{ de N}$$

A partir de estos datos, se obtiene que el porcentaje de oxígeno es del 21,75%.

Para determinar la fórmula empírica del aminoácido:

$$\text{Carbono: } \frac{49,4 \text{ g C}}{12 \text{ g/mol C}} = 4,11 \text{ moles de C}$$

$$\text{Hidrógeno: } \frac{9,65 \text{ g H}}{1 \text{ g/mol H}} = 9,65 \text{ moles de H}$$

$$\text{Nitrógeno: } \frac{19,2 \text{ g N}}{14 \text{ g/mol N}} = 1,37 \text{ moles de N}$$

$$\text{Oxígeno: } \frac{21,75 \text{ g O}}{16 \text{ g/mol O}} = 1,36 \text{ moles de O}$$

Dividiendo estos cocientes por el valor más pequeño se obtiene su fórmula empírica.

Fórmula empírica de (A) = C₃H₇ON, cuya masa es de 73 u.

Como la fórmula molecular es *n* veces la fórmula empírica, la masa molecular del compuesto también será *n* veces la masa de la fórmula empírica.

$$\text{En nuestro caso: } n = \frac{145}{73} = 2$$

Por tanto, su fórmula molecular será: (C₃H₇ON)₂ ↔ C₆H₁₄O₂N₂

5. Un compuesto orgánico, con una masa de 164 g/mol, está formado por carbono, hidrógeno, nitrógeno y oxígeno. Cuando se quemaron 5,00 g del compuesto, se obtuvieron 7,86 g de dióxido de carbono y 1,07 g de agua; el nitrógeno desprendido, recogido sobre agua a 1030 mmHg y 40 °C, ocupaba un volumen de 1200 cm³.

Determina la fórmula molecular del compuesto. (Dato: Presión de vapor del agua a 40 °C = 55 mmHg.)

Todo el carbono del CO₂ proviene del hidrocarburo, y todo el hidrógeno del H₂O también.

Por tanto:

$$7,86 \text{ g CO}_2 \cdot \frac{12 \text{ g C}}{44 \text{ g CO}_2} = 2,14 \text{ g C}$$

$$1,07 \text{ g H}_2\text{O} \cdot \frac{2 \text{ g H}}{18 \text{ g H}_2\text{O}} = 0,12 \text{ g H}$$

Para determinar los gramos de nitrógeno que hay en el compuesto utilizamos la ecuación de los gases:

$$pV = nRT$$

a sabiendas de que la presión real que ejerce el nitrógeno será la presión total que se mide menos la presión del agua a esa temperatura; es decir: 1035 – 55 = 975 mmHg.

Según eso:

$$n = \frac{pV}{RT};$$

$$n = \frac{975/760 \text{ atm} \cdot 1,2 \text{ L}}{0,082 \text{ atm} \cdot \text{L/mol} \cdot \text{K} \cdot 313 \text{ K}} = 0,06 \text{ moles N}_2 \rightarrow$$

$$\rightarrow 0,06 \text{ mol N}_2 \cdot \frac{28 \text{ g}}{1 \text{ mol}} = 1,68 \text{ g N}$$

Y la masa de oxígeno que había en la muestra es:

$$5 - (2,14 + 0,12 + 1,68) = 1,06 \text{ g O}$$

A partir de estos datos, para determinar la fórmula empírica del compuesto:

$$2,14 \text{ g C} \cdot \frac{1 \text{ mol C}}{12 \text{ g C}} = 0,178 \text{ moles C}$$

$$2 \text{ g H} \cdot \frac{1 \text{ mol H}}{1 \text{ g H}} = 0,12 \text{ moles H}$$

$$1,6 \text{ g O} \cdot \frac{1 \text{ mol O}}{16 \text{ g O}} = 0,066 \text{ moles O}$$

$$1,68 \text{ g N} \cdot \frac{1 \text{ mol N}}{14 \text{ g N}} = 0,12 \text{ mol N}$$

Dividiendo entre el valor más pequeño (0,066), se obtiene la fórmula empírica, que en este caso es: C₃H₂O N₂.

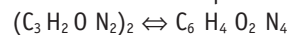
A la que corresponde una masa de 82 g.

Dividiendo ahora la masa molecular del compuesto entre la masa de la fórmula empírica se halla el número de veces que la fórmula molecular contiene a la fórmula empírica.

En nuestro caso:

$$n = \frac{164}{82} = 2$$

Es decir, la fórmula molecular del compuesto será:



6. Formula y nombra una posible fórmula semidesarrollada para cada uno de los siguientes casos:

- Un alcohol: C_3H_8O
- Un aldehído: C_4H_8O
- Un ácido carboxílico: $C_2H_4O_2$
- Una cetona: $C_5H_{10}O$
- Una amina secundaria: C_3H_9N
- Un éter: C_3H_8O
- Un alcohol insaturado: C_4H_8O
- Un nitrilo: C_4H_7N

Pregunta abierta. Podría ser:

- | | |
|--|----------------|
| a) Alcohol: $CH_3-CH_2-CH_2OH$ | 1-propanol |
| b) Aldehído: $CH_3-CH_2-CH_2-CHO$ | butanal |
| c) Ácido carboxílico: CH_3-COOH ácido | etanoico |
| d) Cetona $CH_3-CO-CH_2-CH_2-CH_3$ | 2-pentanona |
| e) Amina secundaria: $CH_3-CH_2-NH-CH_3$ | etilmetilamina |
| f) Éter: $CH_3-O-CH_2-CH_3$ | etilmetiléter |
| g) Alcohol insaturado: $CH_2=CH-CH_2-CH_2OH$ | 3-buten-1-ol |
| h) Nitrilo: $CH_3-CH_2-CH_2-C\equiv N$ | butanonitrilo |

7. Dados los siguientes compuestos: ácido propanoico, propino, propanol y propanamina, justifica para cada uno de ellos:

- Su tendencia a disolverse en agua.
- Su carácter ácido o básico.
- Ordénalos en orden decreciente de punto de ebullición.

a) La solubilidad en agua de los compuestos orgánicos depende de la polaridad del grupo funcional y del tamaño de la cadena carbonada, aunque en estos casos este segundo factor importa menos, ya que son cadenas cortas.

Según eso, el ácido propanoico, el 1-propanol y la 1-propanamina serían totalmente miscibles en agua, mientras que el propino es prácticamente insoluble en agua.

b) El ácido propanoico es el que tiene un carácter ácido más acusado, seguido del propino que, ante una base fuerte y en condiciones drásticas, puede ceder su hidrógeno terminal para formar un acetiluro.

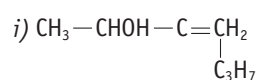
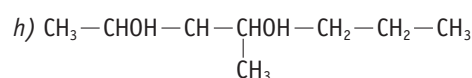
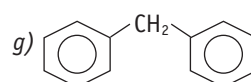
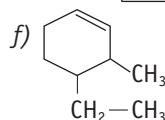
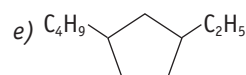
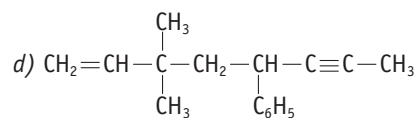
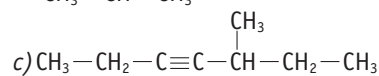
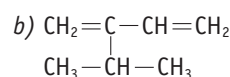
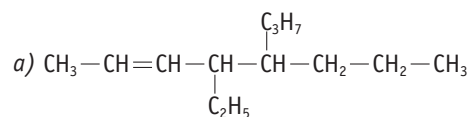
El 1-propanol apenas tiene carácter ácido, y la amina, por el contrario, tiene carácter básico.

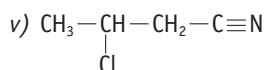
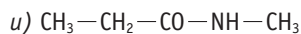
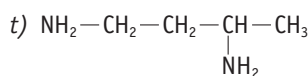
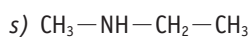
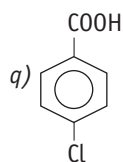
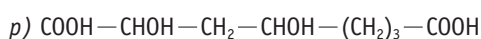
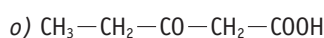
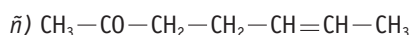
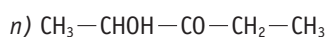
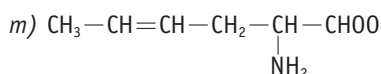
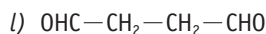
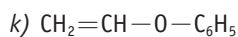
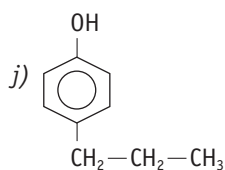
c) Teniendo en cuenta la polaridad del grupo funcional y la masa molecular de cada uno de sus componentes, el orden decreciente sería:

propino < 1-propanamina < 1-propanol < ácido propanoico
 (-23 °C) (+49 °C) (+97 °C) (+141 °C)

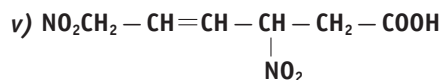
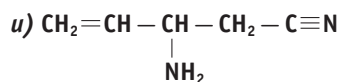
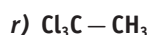
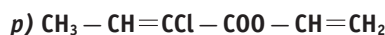
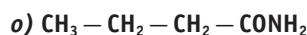
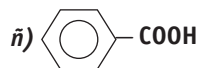
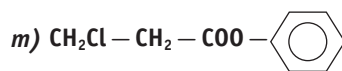
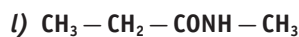
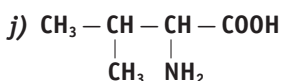
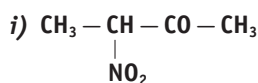
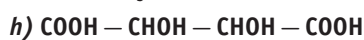
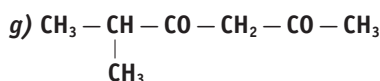
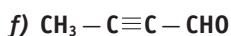
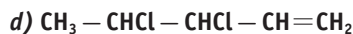
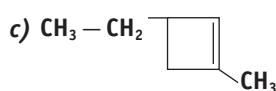
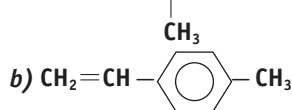
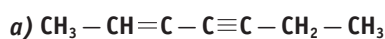
8. Formula los siguientes compuestos:

- 4-etil-5-propil-2-octeno
- 2-isopropilbutadieno
- 5-metil-3-heptino
- 5-fenil-3,3-dimetil-1-octen-6-ino
- 1-butil-3-etilciclopentano
- 4-etil-3-metilciclohexeno
- difenilmetano
- 3-metil-2,4-heptanodiol
- 3-propil-3-buten-2-ol
- p-propilfenol
- etenilfeniléter
- butanodial
- 2-amino-4-hexenal
- 2-hidroxi-3-pentanona
- 5-hepten-2-ona
- ácido 3-oxopentanoico
- ácido 2,4-dihidroxiocetanoico
- ácido 4-clorobenzoico
- acetato de etilo
- N-metiletilamina
- 1,3-butanodiamina
- N-metilpropanamida
- 3-clorobutanonitrilo





9. Nombra los siguientes compuestos:



a) 3-metil-2-hepten-4-ino

b) 1-etil-4-metilbenceno

c) 3-etil-1-metilciclobuteno

d) 3,4-dicloro-1-penteno

e) 3-penten-2-ol

f) 2-butinal

g) 5-metil-2,4-hexanodiona

h) ácido 2,3-dihidroxi-4-butanodioico

i) 3-nitrobutanona

j) ácido 2-amino-3-metilbutanoico

k) propanonitrilo

l) N-metilpropanamida

m) 3-cloropropanoato de fenilo

n) etilpropiléter

ñ) ácido benzoico

o) butanamida

p) 2-cloro-2-butenato de etileno

q) 1-amino-5-hexin-3-ona

r) 1,1,1-tricloroetano

s) N-metil-6-metil-3-oxo-4-heptenamida

t) trihidroxi-2-butanal

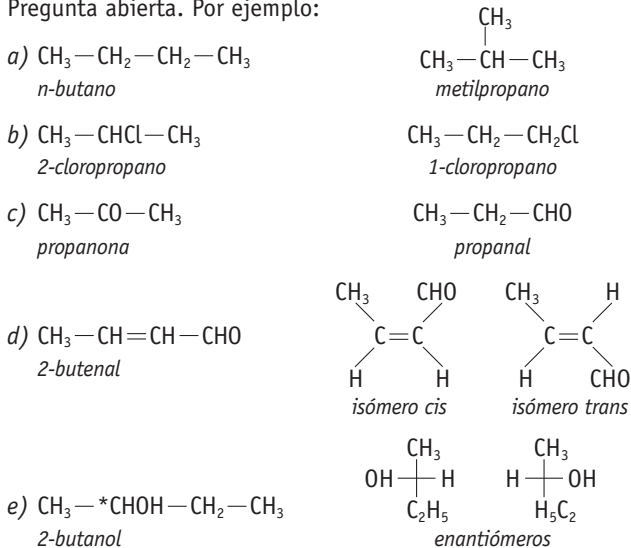
u) 3-amino-4-pentenitrilo

v) ácido 3,6-dinitro-4-hexenoico

10. Formula y nombra en cada caso:

- a) Un alcano que presente isomería de cadena.
- b) Un derivado halogenado que presente isomería de posición.
- c) Un compuesto oxigenado con isomería de función.
- d) Un aldehído insaturado con isomería cis-trans.
- e) Un alcohol con isomería óptica.

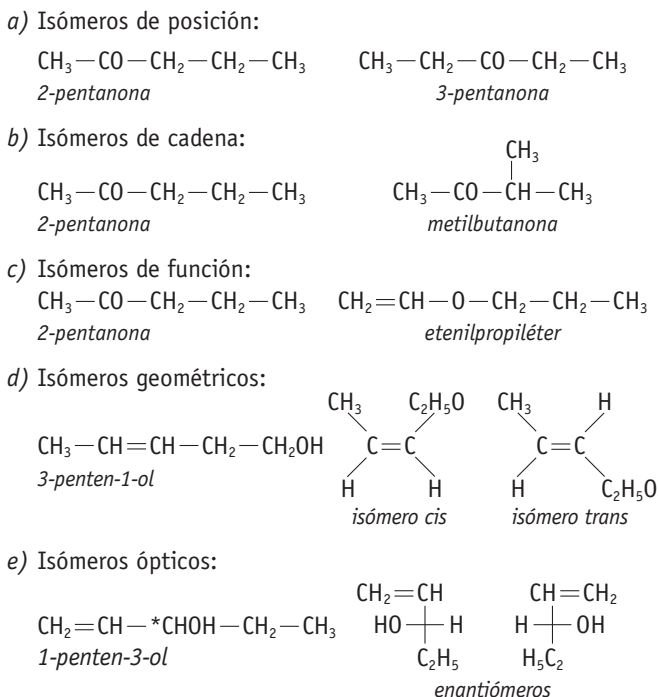
Pregunta abierta. Por ejemplo:



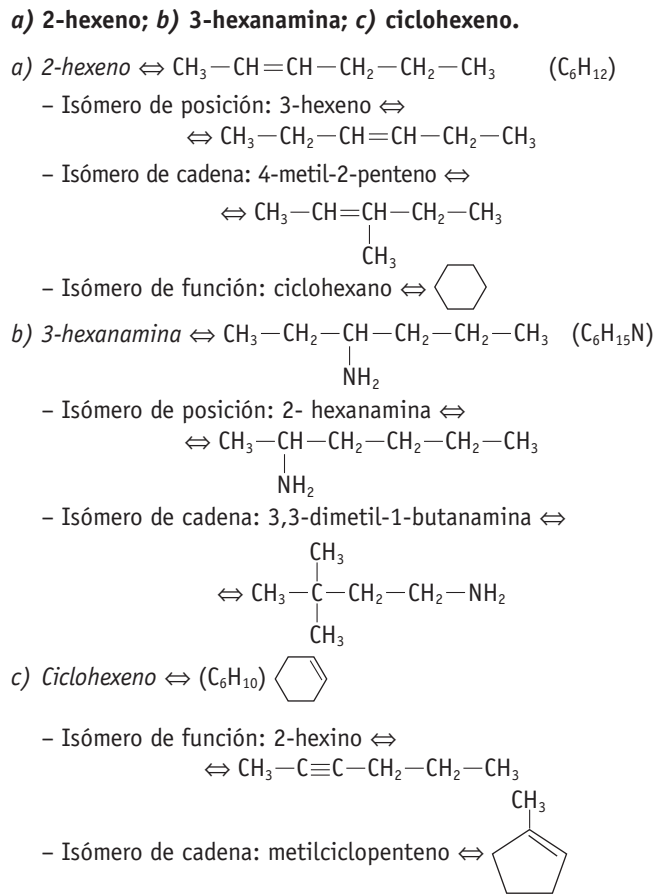
11. Para la fórmula molecular $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$, formula y nombra dos posibles isómeros de:

- a) Posición.
- b) Cadena.
- c) Función.
- d) Geométricos.
- e) Ópticos.

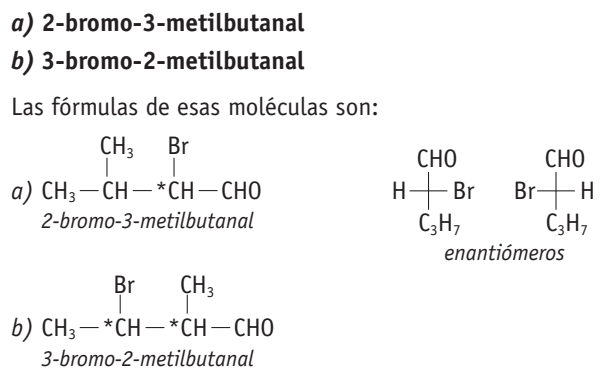
Esa fórmula molecular, $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$, puede corresponder a los siguientes isómeros:



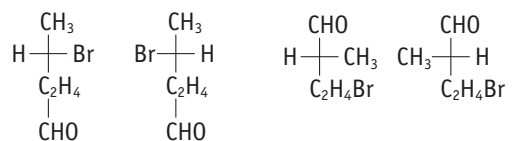
12. Indica el tipo de isomería estructural que pueden presentar los siguientes compuestos:



13. Señala los carbonos asimétricos de los siguientes compuestos y representa sus posibles isómeros ópticos:



Al tener 2 carbonos asimétricos, tendrá $2^2 = 4$ isómeros ópticos:



14. a) Deduce la fórmula de una sustancia de masa molecular 60 u y que está compuesta por un 60% de carbono, un 13,3% de hidrógeno y el resto de oxígeno.

PAU

b) Nombra tres isómeros de dicha sustancia.

a) A partir de los porcentajes de los elementos que tiene la sustancia:

$$60 \text{ g C} \cdot \frac{1 \text{ mol C}}{12 \text{ g C}} = 5 \text{ moles C}$$

$$13,3 \text{ g H} \cdot \frac{1 \text{ mol H}}{1 \text{ g H}} = 13,3 \text{ moles H}$$

$$26 \text{ g O} \cdot \frac{1 \text{ mol O}}{16 \text{ g O}} = 1,67 \text{ moles O}$$

Dividiendo entre 1,67 se obtiene la fórmula empírica: $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$
Como la masa de la fórmula empírica (60 u) coincide con la masa molecular (60 u), significa que ambas fórmulas son iguales; es decir, su fórmula molecular es: $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$.

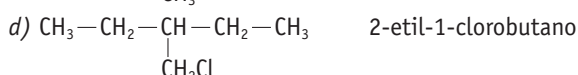
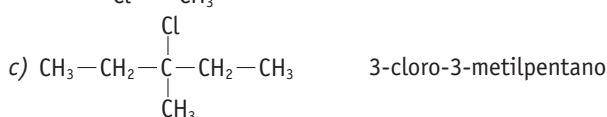
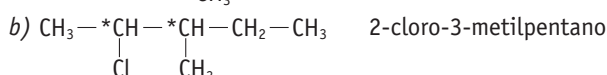
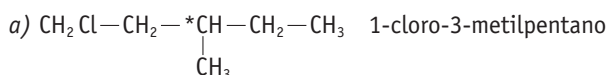
b) Tres compuestos, isómeros entre sí, serían:



15. Formula y nombra todos los isómeros que resultan de sustituir, en el 3-metilpentano, un hidrógeno por un cloro en distintas posiciones. Justifica cuál presentará isomería óptica.

El 3-metilpentano es $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$

Los posibles derivados monoclorados serían:



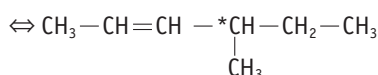
Además:

- El compuesto a) tiene dos isómeros ópticos, ya que el C-3 es asimétrico.

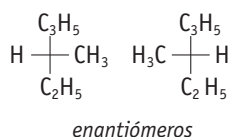
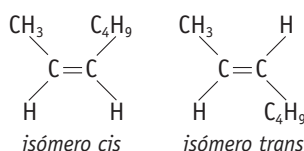
- El compuesto b) tiene cuatro isómeros ópticos, ya que el C-2 y el C-3 son asimétricos.

16. Formula todos los estereoisómeros posibles del 4-metil-2-hexeno; indica el tipo de isomería en cada caso.

A partir de la fórmula del 4-metil-2-hexeno \Leftrightarrow



Se comprueba que tiene dos isómeros *cis-trans* y para cada uno de ellos, dos isómeros ópticos, ya que el C-4 es asimétrico:



17. ¿Qué diferencia hay entre una mezcla racémica y una forma meso?

Las dos son ópticamente inactivas. La mezcla racémica por compensación entre los giros levógiro y dextrógiro de los dos enantiómeros; la forma meso es inactiva por naturaleza, ya que la molécula no es asimétrica, pues tiene plano de simetría y es idéntica a su imagen especular.

18. a) ¿Qué se entiende por radical libre? ¿A qué debe su reactividad?

b) Escribe tres factores que favorezcan las reacciones a través de radicales libres.

a) El radical libre es una especie química con un electrón desapareado, que normalmente se ha generado por la ruptura homolítica de un enlace covalente. Su reactividad surge de su propia inestabilidad, ya que al tener un electrón desapareado tiende a cederlo o compartirlo para formar enlace covalente.

b) Se favorecen las reacciones a través de radicales libres cuando:

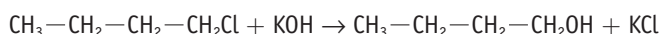
- Los enlaces de los sustratos y reactivos son poco polares.
- Se usan peróxidos para iniciar la reacción.
- Se realiza en fase gaseosa y en presencia de luz UV.

19. Escribe la ecuación correspondiente a la reacción entre el 1-clorobutano y el hidróxido potásico diluido y contesta a las siguientes cuestiones:

a) ¿Cuál es el sustrato y cuál el reactivo?

b) ¿Qué tipo de reacción es? ¿Por qué se denomina así?

La ecuación de la reacción química sería:



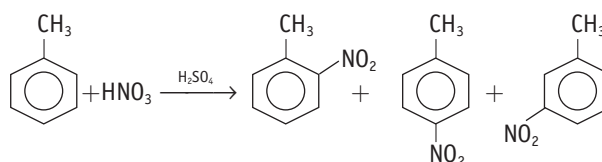
a) El sustrato es el 1-clorobutano, y el reactivo el hidróxido potásico.

b) Es una reacción de sustitución nucleófila. Se denomina así porque el reactivo atacante (nucleófilo) busca zonas del sustrato de baja densidad electrónica ($\text{C}^{\delta+}$), como ocurre en la unión C-Cl, ya que el enlace está distorsionado debido a la mayor electronegatividad del cloro con respecto al carbono. El reactivo OH^- «sustituye» al cloro del sustrato para formar el correspondiente alcohol.

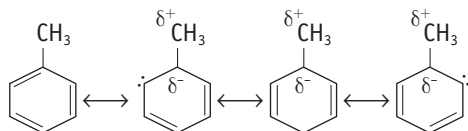
20. a) En la nitración del tolueno (metilbenceno), el grupo nitro ($-\text{NO}_2$) se distribuye según la siguiente proporción: *orto*- 57%; *meta*- 3% y *para*- 40%. Explica a qué se deben esas diferencias.

b) En la nitración del *terc*-butilbenceno (metilpropilbenceno), esos porcentajes son: *orto*- 12%; *meta*- 8% y *para*- 80%. ¿Cómo justificas esa modificación en los porcentajes?

a) La nitración del tolueno se puede expresar según:

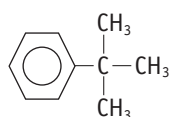


Los grupos +I, como es el grupo metilo $-\text{CH}_3$, activan el anillo bencénico hacia posiciones *orto* y *para*, lo que facilita el ataque del reactivo electrófilo en esas posiciones:



Hay mayor proporción del compuesto *orto* porque son dos los carbonos que pueden ser atacados por el grupo electrófilo NO^+ , mientras que la activación en la posición *para* solo afecta a un carbono.

Además, como la posición *meta* no se activa, apenas hay ese derivado nitrado.



tert-butilbenceno

- b) Este es el *tert*-butilbenceno. Ahora hay un impedimento estérico para que el grupo NO_2^+ pueda atacar a los dos carbonos adyacentes al radical alquilo; de ahí que sea mayoritariamente la forma *para* la que se forme.

21. Contesta razonadamente:

- ¿Para qué se utilizan los peróxidos en las adiciones radicálicas?
- Enuncia la regla de Markownikoff. ¿En qué tipos de reacciones se emplea?
- ¿Por qué las adiciones nucleófilas son características de los aldehídos y cetonas?
- Cuando en una eliminación se pueden obtener dos alquenos, ¿qué isómero aparece en mayor proporción? ¿Qué ley empírica estás utilizando?
- ¿Qué sustancias se suelen utilizar en las reacciones de oxidación de un alcohol primario a un ácido? ¿Y en las de reducción del ácido a alcohol?
- ¿Por qué las reacciones de combustión distinguen a los compuestos orgánicos de los inorgánicos?

- Porque los peróxidos generan radicales libres con facilidad, y por tanto facilitan y promueven las reacciones con mecanismo radicalico.
- Cuando se adiciona un reactivo asimétrico en una adición electrófila, la parte electropositiva del reactivo se une al carbono más hidrogenado y la parte electronegativa al carbocatión correspondiente. De ahí, que de los posibles isómeros que se forman, uno sea más abundante que los demás.
- Porque esas reacciones se producen cuando son atacados dobles o triples enlaces polarizados en los que el carbono tiene una ligera carga positiva. Y esa característica acompaña al grupo carbonilo $\delta^+\text{C}=\text{O}^{\delta-}$ de los aldehídos y las cetonas, debido al desplazamiento del par electrónico *pi* hacia el átomo de oxígeno.
- Al formarse el doble enlace entre el carbono que pierde el átomo o grupo atómico electronegativo y uno de los car-

bonos adyacentes, el hidrógeno que cede este carbono sale mayoritariamente del carbono más sustituido (con menos hidrógenos). Es la llamada Regla de Saytzeff.

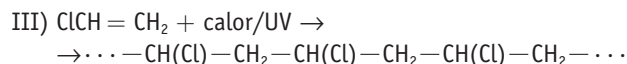
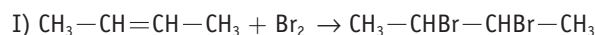
- Como oxidantes, permanganatos y dicromatos (KMnO_4 y $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$); como reductores hidruros dobles de metales alcalinos (AlLiH_4 y NaBH_4).
- Porque los compuestos inorgánicos no se «quemán» convirtiéndose en CO_2 y H_2O ; simplemente, se descomponen con el calor. Ejemplo: $\text{CaCO}_3 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{CaO}$

22. a) Formula las sustancias orgánicas que aparecen en las reacciones siguientes:

- 2-buteno + bromo \rightarrow 2,3-dibromobutano
- 1-propanol + ác. bromhídrico \rightarrow 1-bromopropano + agua
- cloroeteno + calor/UV \rightarrow PVC

- b) Identifica en ellas alguna especie nucleófila y alguna electrófila. Diferencia también las reacciones de sustitución y de adición.

- a) Las reacciones que nos piden son:



- b) En la reacción I), el Br_2 es un reactivo electrófilo que ataca el doble enlace $\text{C}=\text{C}$; según eso, es una adición electrófila.

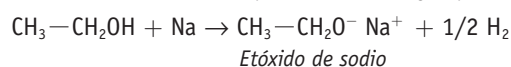
En la reacción II), el HBr actúa como reactivo nucleófilo que sustituye al grupo OH del alcohol; es, por tanto, una sustitución nucleófila.

En la reacción III), la ruptura del doble enlace $\text{C}=\text{C}$ es homolítica y, por tanto, es una adición radicalica.

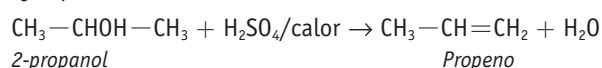
23. Discute, razonadamente, si son ciertas o falsas las siguientes afirmaciones referidas a la reactividad de los alcoholes:

- Tienen carácter ácido débil.
- Por deshidratación intramolecular dan alquenos en una reacción de eliminación.
- No pueden dar reacciones de sustitución electrófila.
- Los alcoholes primarios se oxidan fácilmente, pudiéndose llegar a obtener un ácido del mismo número de átomos de carbono.

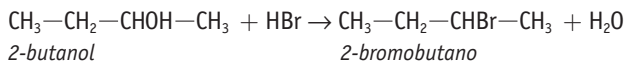
- a) Si, ya que debido al carácter polar del enlace OH , pueden ceder el hidrógeno, cuando reaccionan con un metal o un hidruro, dando la correspondiente sal. Ejemplo:



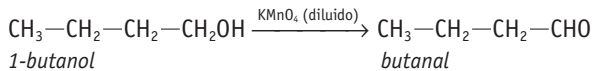
- b) Sí; es una reacción de eliminación que se favorece con calor y con un ácido que ayuda a protonar el grupo hidroxilo (habitualmente ácido sulfúrico, por su carácter deshidratante). Ejemplo:



- c) Es cierto; no dan reacciones de sustitución electrófila, sino de sustitución nucleófila, en las que pierden su grupo OH y lo sustituyen por un átomo o grupo atómico nucleófilo. Ejemplo:



- d) Sí; utilizando KMnO_4 y $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ como agentes oxidantes. Ejemplo:



24. A partir del 2-butanol, escribe las ecuaciones y nombra los productos obtenidos en los procesos de:

- a) Combustión.
 b) Oxidación suave.
 c) Deshidratación en caliente con ácido sulfúrico.
 d) Reacción con el ácido bromhídrico.
 e) Reacción con el ácido etanoico en medio ácido.

El 2-butanol es $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CHOH}-\text{CH}_3$.

Las ecuaciones correspondientes a los procesos que nos indican serán:

- a) Combustión:

$$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CHOH}-\text{CH}_3 + 6 \text{O}_2 \rightarrow 4 \text{CO}_2 + 5 \text{H}_2\text{O}$$
- b) Oxidación suave:

$$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CHOH}-\text{CH}_3 \xrightarrow{\text{KMnO}_4 \text{ (diluido)}} \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{CH}_3$$

butanona
- c) Deshidratación:

$$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CHOH}-\text{CH}_3 \xrightarrow[180^\circ\text{C}]{\text{ácido sulfúrico concentrado}} \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}_2$$

1-buteno (minoritario)
 $+ \text{H}_2\text{O} + \text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3$
2-buteno (mayoritario)
- d) Sustitución nucleófila:

$$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CHOH}-\text{CH}_3 + \text{HBr} \rightarrow \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CHBr}-\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$$

2-bromobutano
- e) Esterificación:

$$\text{CH}_3-\text{COOH} + \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CHOH}-\text{CH}_3 \rightarrow$$

$$\rightarrow \text{CH}_3-\text{COO}-\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$$

etanoato de 1-metilpropilo

25. Escribe un ejemplo representativo de cada una de las siguientes reacciones orgánicas. Formula y nombra los reactivos implicados y los productos que se obtienen:

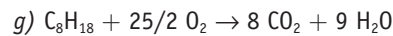
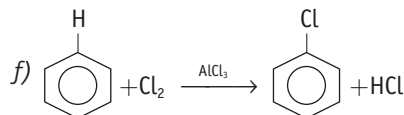
- a) Reacción de sustitución de derivados halogenados por grupos hidroxilo.
 b) Reacción de esterificación.
 c) Reacción de eliminación (alcoholes con H_2SO_4 cc).
 d) Reacción de oxidación de alcoholes primarios.
 e) Reacción de reducción de cetonas.

f) Reacción de cloración del benceno.

g) Reacción de combustión del octano.

Pregunta abierta. Serían válidas, por ejemplo:

- a) $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{Br} + \text{NaOH} \rightarrow \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} + \text{NaBr}$
1-bromopropano *1-propanol*
- b) $\text{CH}_3-\text{COOH} + \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} \xrightarrow{\text{H}^+} \text{CH}_3-\text{COO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$
Ácido etanoico *1-propanol* *Etanoato de propilo*
- c) $\text{CH}_3-\text{CHOH}-\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{SO}_4/\text{calor} \rightarrow \text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}_2 + \text{H}_2\text{O}$
2-propanol *Propeno*
- d) $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} \xrightarrow{\text{KMnO}_4 \text{ (diluido)}} \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CHO}$
1-butanol *Butanal*
- e) $\text{CH}_3-\text{CO}-\text{CH}_3 + \text{H}_2 \xrightarrow{\text{NaBH}_4} \text{CH}_3-\text{CHOH}-\text{CH}_3$
Propanona *2-propanol*

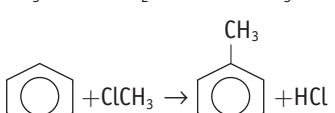


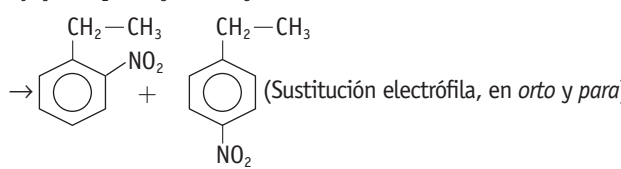
Para profundizar

26. Completa las siguientes ecuaciones químicas, clasificándolas como sustitución, adición, eliminación, esterificación, combustión...

- a) propeno + HBr \longrightarrow
 b) benceno + clorometano $\xrightarrow{\text{H}^+/\text{AlCl}_3}$
 c) 2-bromo-2-metilbutano + KOH/etanol \longrightarrow
 d) etano + $\text{Cl}_2 \xrightarrow{\text{UV}}$
 e) propanal + HCN \longrightarrow
 f) butan-2-ol + $\text{H}_2\text{SO}_4 \xrightarrow{\text{calor}}$
 g) bromuro de tercbutilo + NaOH \longrightarrow
 h) ácido propanoico + etanol $\xrightarrow{\text{H}^+}$
 i) n ($\text{CH}_2=\text{CHCl}$) $\xrightarrow{\text{peróxidos}}$
 j) $\text{C}_2\text{H}_6\text{O} + \text{O}_2 \longrightarrow$
 k) etilbenceno + $\text{HNO}_3 + \text{H}^+ \longrightarrow$
 l) etanol + H_2SO_4 (dil) $\xrightarrow{80^\circ\text{C}}$
 m) tripalmitato de glicerina + 3 NaOH \longrightarrow

Las reacciones que nos proponen se pueden representar según:

- a) $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}_2 + \text{HBr} \rightarrow \text{CH}_3-\text{CHBr}-\text{CH}_3$ (Adición electrófila)
- b)  (Sustitución electrófila)
- c) $\text{CH}_3-\underset{\text{CH}_3}{\text{C}}\text{Br}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 + \text{KOH/etanol} \rightarrow$
 $\rightarrow \text{CH}_3-\underset{\text{CH}_3}{\text{C}}=\text{CH}-\text{CH}_3 + \text{KBr} + \text{H}_2\text{O}$ (Eliminación)

- d) $\text{CH}_3-\text{CH}_3 + \text{Cl}_2 \xrightarrow{\text{UV/calor}} \text{CH}_3-\text{CH}_2\text{Cl} + \text{CH}_2\text{Cl}-\text{CH}_2\text{Cl} + \dots$
(Sustitución radicalica)
- e) $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CHO} + \text{HCN} \rightarrow \text{CH}_3-\text{CH}_2-\underset{\text{OH}}{\text{CH}}-\text{CN}$
(Adición nucleófila)
- f) $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CHOH}-\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{SO}_4 \text{ cc/calor} \rightarrow$
 $\rightarrow \text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3$ (mayoritario)
 $+ \text{H}_2\text{O}$ (Eliminación)
 $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}_2$ (minoritario)
- g) $(\text{CH}_3)_3-\text{CBr} + \text{NaOH/acetona} \rightarrow (\text{CH}_3)_2-\text{C}=\text{CH}_2 + \text{NaBr} + \text{H}_2\text{O}$
(Eliminación)
- h) $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{COOH} + \text{CH}_3-\text{CH}_2\text{OH} \xrightarrow{\text{H}^+} \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{COO}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$
(Esterificación)
- i) $n (\text{CH}_2=\text{CHCl}) \xrightarrow{\text{peróxidos}} \dots [-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{Cl})-]_n \dots$ (Polimerización)
- j) $\text{C}_2\text{H}_6\text{O} + 3 \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{CO}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$ (Combustión)
- k) $\text{C}_6\text{H}_5-\text{CH}_2-\text{CH}_3 + \text{HNO}_3 + \text{H}^+ \rightarrow$
 (Sustitución electrófila, en *orto* y *para*)
- l) $2 \text{CH}_3-\text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2\text{SO}_4(\text{dil}) \rightarrow \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$
(Eliminación)
- m) Saponificación (Hidrólisis básica):
 $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{14}-\text{COO}-\underset{\text{CH}_2}{\text{CH}}$
 $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{14}-\text{COO}-\underset{\text{CH}_2}{\text{CH}} + 3 \text{NaOH} \rightarrow$
 $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{14}-\text{COO}-\text{CH}_2$
 $\rightarrow \underset{\text{CH}_2\text{OH}}{\text{CHOH}} + 3 \text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{14}-\text{COONa}$
 CH_2OH

27. Razona si son ciertas o falsas las siguientes afirmaciones:

- Los hidrocarburos saturados pueden adicionar átomos de cloro.
- Los hidrocarburos etilénicos dan reacciones de adición con los halogenuros de hidrógeno.
- El benceno es proclive a dar reacciones de sustitución nucleófila.
- El etanol puede dar un éter en reacción con ácido sulfúrico diluido.
- Las reacciones radicalicas se favorecen si ocurren en fase gaseosa.
- En las reacciones de eliminación, el hidrógeno sale del carbono más sustituido.
- La hidrólisis básica de un éster es precursora de los jabones.
- Con la Regla de Markownikoff se determina el isómero más probable en una adición electrófila.

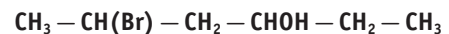
i) El eteno puede producir reacción de adición.

j) Los alcoholes se reducen a ácidos orgánicos.

k) La deshidratación del etanol por ácido sulfúrico produce eteno.

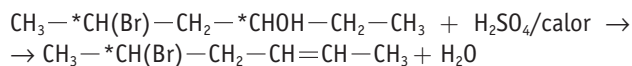
- No; ya que no hay dobles enlaces. En todo caso, se sustituirían átomos de hidrógeno por átomos de cloro.
- Sí; es una reacción típica de adición electrófila, formándose el correspondiente derivado halogenado.
- No; la reacción típica del benceno es la sustitución electrófila, ya que el anillo bencénico tiene alta densidad electrónica.
- Sí; si las condiciones de eliminación no son muy drásticas (ácido sulfúrico concentrado y 200 °C), se puede formar el dietiléter.
- Sí, ya que se favorecen los choques entre las partículas y la ruptura homolítica de sus enlaces.
- No; el hidrógeno sale del carbono que menos hidrógenos tiene, es decir, el menos sustituido (Regla de Saytzeff).
- Sí; es la denominada reacción de saponificación, o hidrólisis básica.
- Sí; en reactivos asimétricos, la parte negativa del reactivo se une al carbocatión más estable y la parte positiva (normalmente H) al otro carbono, más hidrogenado.
- Sí, puede dar reacciones de adición radicalica o de adición electrófila, según sean las condiciones de reacción y el reactivo que actúe.
- No; los alcoholes se oxidan a ácidos orgánicos y se reducen a hidrocarburos.
- Sí en condiciones drásticas de temperatura (200 °C) y ácido sulfúrico concentrado. En condiciones de reacción más suaves, los alcoholes primarios no se convierten en alquenos, sino que forman éteres.

28. Las algas rojas se han especializado en elaborar compuestos halogenados como sistema defensivo para no ser comidas, con estructuras similares a la que se indica:



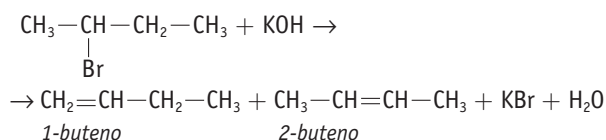
- Indica si dicho compuesto posee carbonos quirales. Señálalos con un asterisco.
 - Indica las hibridaciones de los carbonos C-3 y C-5, razonando la respuesta.
 - Si ese compuesto por reacción da lugar a la formación de un doble enlace entre los carbonos C-2 y C-3, más una molécula de agua, ¿de qué tipo de reacción se trata? Escribe su ecuación correspondiente.
- a) La sustancia sintetizada por las algas es el 5-bromo-3-hexanol:
- $$\text{CH}_3-\text{*CH}(\text{Br})-\text{CH}_2-\text{*CHOH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$$
- y tiene 2 carbonos quirales: el C-3 y el C-5.
- b) En ambos casos tienen hibridación sp^3 , ya que forman 4 enlaces sencillos sigma dirigidos a los vértices de un tetraedro.

- c) Es una reacción de eliminación (deshidratación de un alcohol) que se favorece en presencia de ácido sulfúrico y calor. La reacción sería:



29. Al reaccionar el 2-bromobutano con KOH concentrado, se obtienen tres isómeros alquénicos. Escribe sus fórmulas y justifica cuál de ellos estará en mayor proporción.

- a) La reacción de eliminación que tiene lugar se puede expresar según:



Se obtiene el 1-buteno y el 2-buteno, que a su vez tendrá isómero *cis* e isómero *trans*.

Estará en mayor proporción el 2-buteno (Regla de Saytzeff), y de sus isómeros el isómero *trans* por cuestiones estéricas.

30. El alcohol terc-butílico $(\text{CH}_3)_3\text{C}-\text{OH}$ reacciona con la misma velocidad con el HCl, HBr y HI para formar el derivado halogenado correspondiente. Sin embargo, para el 1-butanol la velocidad varía según: $\text{HI} > \text{HBr} > \text{HCl}$. ¿A qué se debe esa diferencia?

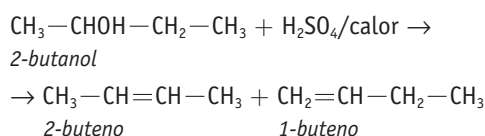
En el primer caso, la reacción es una sustitución nucleófila unimolecular ($\text{S}_{\text{N}}1$), ya que el carbocatión que se forma es muy estable; por eso, la cinética solo depende de la concentración del sustrato y no de la del reactivo, y es indiferente el hidrácido que ataque al sustrato.

En el segundo caso, es más probable la sustitución nucleófila bimolecular ($\text{S}_{\text{N}}2$), y por tanto la velocidad de la reacción depende de la concentración del sustrato y del reactivo. A igualdad de concentración de este último, se favorece la reacción cuanto más débil sea el enlace, ya que indicaría que la capacidad nucleófila del reactivo es mayor.

31. a) Escribe la reacción que se produce al tratar 2-butanol con ácido sulfúrico, en caliente, justificando cuál será el producto mayoritario obtenido.

- b) Formula los estereoisómeros correspondientes, tanto al compuesto de partida como al producto de reacción mayoritario, especificando el tipo de isomería en cada caso.

- a) La reacción que tiene lugar se puede expresar como:

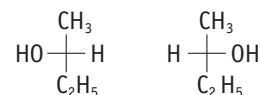


Es una deshidratación de un alcohol secundario que se suele realizar con un mecanismo unimolecular (E_1) debido a la estabilidad del carbocatión que se forma.

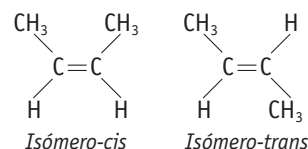
El alqueno mayoritario sería el 2-buteno, ya que, siguiendo la Regla de Saytzeff, el hidrógeno que sale del sustrato lo

hace del carbono menos sustituido (el carbono que menos hidrógenos tiene).

- b) El 2-butanol tiene un carbono asimétrico, el C-2, y por tanto dos isómeros ópticos, enantiómeros entre sí:



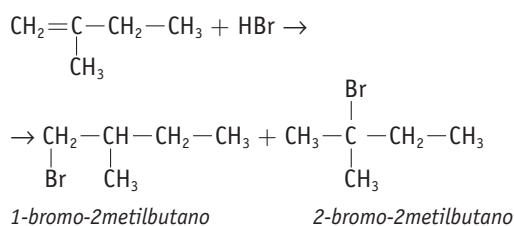
El 2-buteno, tiene dos isómeros geométricos *cis-trans*:



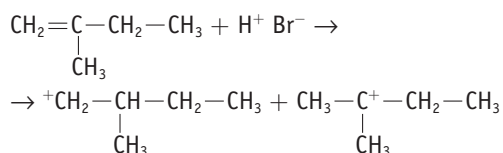
32. El 2-metil-1-buteno reacciona con el ácido bromhídrico para dar dos halogenuros de alquilo.

- a) ¿Qué tipo de reacción orgánica es?
b) ¿Cuál será su mecanismo más probable?
c) Justifica cuál de los halogenuros estará en mayor proporción en función de la estabilidad de los intermedios de reacción. ¿Qué regla se cumple?

- a) Es una reacción de adición electrófila al doble enlace $\text{C}=\text{C}$; su ecuación sería:

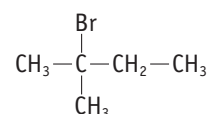


- b) El mecanismo más probable es unimolecular, con un primer paso, más lento, que supone la ruptura del enlace $\text{C}=\text{C}$ por la adición del H^+ y la formación de un carbocatión; en el segundo paso se adiciona el ion negativo Br^- a dicho carbocatión.
c) Estará en mayor proporción el compuesto que estabilice mejor el carbocatión durante el proceso de la reacción. De las dos posibilidades que hay:



En el segundo caso, el carbocatión es más estable, ya que es un carbocatión terciario, y por tanto con más posibilidades de que se le una el anión Br^- .

Según eso, el isómero:

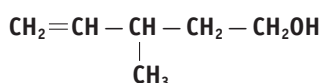


estará en mayor proporción.

Se cumple la regla de Markownikoff, ya que el hidrógeno se adiciona al carbono más hidrogenado.

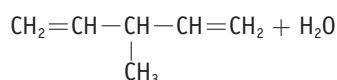
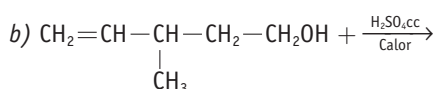
33. A partir del siguiente compuesto orgánico:

PAU

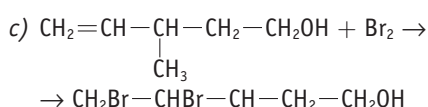


- a) Escribe su nombre sistemático.
 b) Formula una posible reacción de eliminación en la que intervenga este compuesto.
 c) Formula una reacción de adición al doble enlace.
 d) Formula una reacción de sustitución en la que intervenga este compuesto.

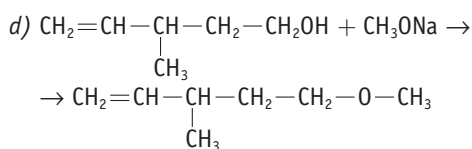
a) El compuesto: $\text{CH}_2=\text{CH}-\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH}$
 es el 3-metil-4-penten-1-ol



3-metil-1,4-pentadieno



3-metil-4,5-dibromo-1-pentanol



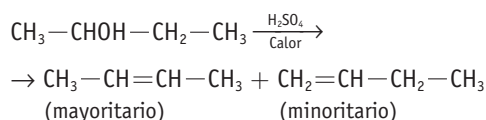
(3-metil-4-pentenil)-metiléter

34. Escribe una reacción típica de los siguientes compuestos, clasificándola según sea de sustitución, adición, eliminación, esterificación, combustión...

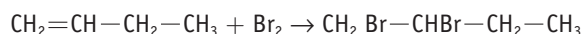
- a) Alcoholes. b) Alquenos.
 c) Aldehídos. d) Ácidos carboxílicos.
 e) Alcanos. f) Derivados halogenados.
 g) Benceno. h) Cetonas.

Pregunta abierta. Por ejemplo:

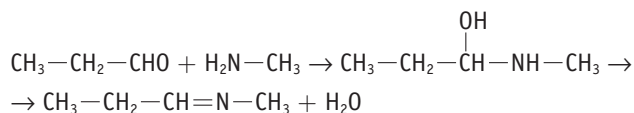
a) Alcoholes \rightarrow eliminación en medio ácido:



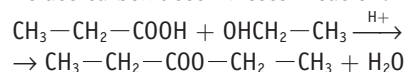
b) Alquenos \rightarrow adición electrófila:



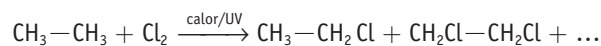
c) Aldehídos \rightarrow adición nucleófila de una amina:



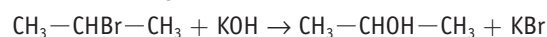
d) Ácidos carboxílicos \rightarrow esterificación:



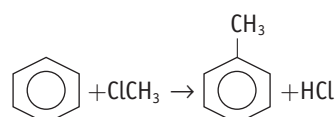
e) Alcanos \rightarrow sustitución radicalica:



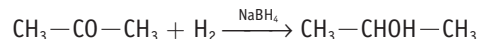
f) Derivados halogenados \rightarrow sustitución nucleófila:



g) Benceno \rightarrow sustitución electrófila:



h) Cetonas \rightarrow Reducción a un alcohol secundario:

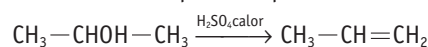


35. Justifica si las siguientes reacciones son de adición, eliminación, sustitución, etc.

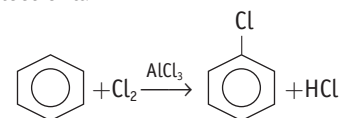
- a) Obtención de alquenos a partir de alcoholes.
 b) Obtención de derivados halogenados aromáticos a partir del benceno.
 c) Obtención de ésteres por reacción de un ácido y un alcohol.
 d) Obtención de derivados halogenados saturados a partir de alquenos.
 e) Obtención de derivados halogenados saturados a partir de alcoholes.
 f) Obtención de alcoholes a partir de alquenos.
 g) Obtención de amidas a partir de un ácido y amoniaco.
 h) Obtención de aldehídos a partir de alcoholes.

Las reacciones que nos piden son:

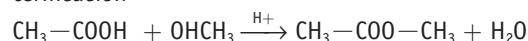
a) Obtención de alquenos a partir de alcoholes \Leftrightarrow eliminación



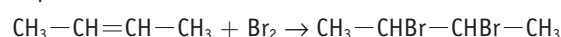
b) Obtención de derivados halogenados a partir del benceno \Leftrightarrow sustitución electrófila



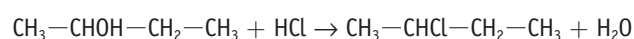
c) Obtención de ésteres por reacción de ácido y alcohol \Leftrightarrow esterificación



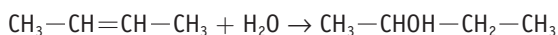
d) Obtención de derivados halogenados saturados a partir de alquenos \Leftrightarrow adición electrófila



e) Obtención de derivados halogenados saturados a partir de alcoholes \Leftrightarrow sustitución nucleófila



f) Obtención de alcoholes a partir de alquenos \Leftrightarrow adición electrofílica



g) Obtención de una amida \Leftrightarrow condensación



h) Obtención de aldehídos a partir de alcoholes \Leftrightarrow oxidación



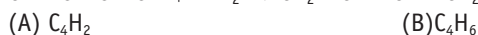
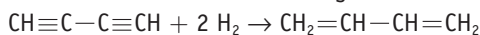
36. A una muestra de 100 g de un hidrocarburo lineal C_4H_2 (A) se le adiciona hidrógeno.

a) Calcula el volumen de hidrógeno, medido a 700 mmHg y 50 °C, que ha reaccionado si se obtiene el producto C_4H_6 (B).

b) Calcula los moles de bromo que habría que añadir a la cantidad obtenida del compuesto (B) para que desaparezcan totalmente los dobles enlaces y se forme el producto (C).

c) Formula y nombra los compuestos (A) (B) y (C) y escribe las reacciones que describe el enunciado.

a) La reacción de adición del hidrógeno será:



$$100 \text{ g (A)} \cdot \frac{1 \text{ mol (A)}}{50 \text{ g (A)}} \cdot \frac{2 \text{ mol H}_2}{\text{mol (A)}} = 4 \text{ moles H}_2$$

$$pV = nRT \rightarrow$$

$$\rightarrow V = \frac{nRT}{p} = \frac{4 \text{ mol} \cdot 0,082 \text{ atm L/mol} \cdot \text{K} \cdot 323 \text{ K}}{700/760 \text{ atm}} \rightarrow$$

$$\rightarrow V = 115 \text{ L de H}_2$$

b) $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2 + 2 \text{Br}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{Br}-\text{CHBr}-\text{CHBr}-\text{CH}_2\text{Br}$
(B) C_4H_6 (C) $\text{C}_4\text{H}_6\text{Br}_4$

Como se parte de 2 moles del compuesto (B), y la relación estequiométrica es 2:1, se necesitarán 4 moles de Br_2 .

c) Compuesto (A): butadieno.

Compuesto (B): 1,3-butadieno.

Compuesto (C): 1,2,3,4-tetrabromobutano.

37. En el ciclo del ácido cítrico o ciclo de Krebs, la enzima *succinato deshidrogenasa* transforma el ácido succínico (ácido butanodioico) en ácido fumárico (ácido trans-butenodioico). Dados los siguientes compuestos, justifica cuál de ellos podría ser un inhibidor de la reacción anterior:

a) $\text{COOH}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{COOH}$

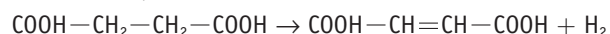
b) $\text{COOH}-\text{CH}_2-\text{COOH}$

c) $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{COOH}$

d) $\text{COOH}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{COOH}$

S: El compuesto b).

La reacción que cataliza la enzima es:



Ácido butanodioico (succínico)

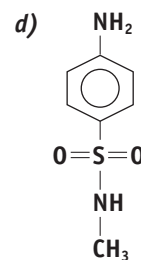
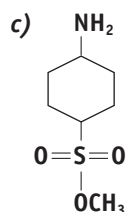
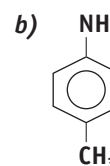
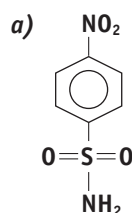
Ácido butenodioico

Los inhibidores competitivos se combinan con la enzima impidiendo la unión de la enzima con el sustrato previsto; para ello, deben tener una estructura molecular similar a la del sustrato en lo que respecta a la cadena carbonada y los grupos funcionales.

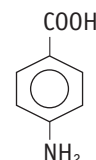
Como el ácido succínico tiene una estructura que no es plana, podemos eliminar como competidores los compuestos planos, como el d) y los compuestos lineales, como el a).

De los otros dos compuestos, el c) tiene un solo grupo ácido, por tanto también se puede eliminar; quedando únicamente el compuesto b) como posible inhibidor competitivo para la acción enzimática.

38. El ácido p-aminobenzoico (PAB) forma parte del grupo de la vitamina B y es un metabolito esencial para el crecimiento de muchas bacterias. De los siguientes compuestos, justifica cuál sería el más indicado como medicamento para inhibir el crecimiento de esas bacterias:



La fórmula del ácido *para*-aminobenzoico o ácido 4-aminobenzoico se caracteriza por tener una estructura plana (anillo aromático), un grupo básico ($-\text{NH}_2$) y un grupo que puede ceder un protón.

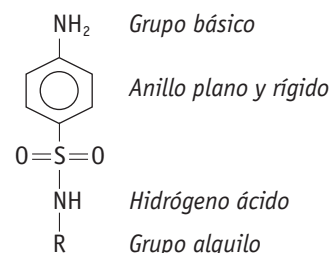


El compuesto a) no tiene el grupo básico; el compuesto b) no tiene el grupo ácido y el compuesto c) no tiene la estructura plana del anillo benzénico.

Únicamente el compuesto d) reúne las tres características: tiene el grupo básico $-\text{NH}_2$, mantiene la estructura plana del anillo benzénico y puede ceder el protón que acompaña al nitrógeno en el grupo $\text{SO}_2-\text{NH}-\text{CH}_3$.

En realidad, esa estructura es característica de unos fármacos denominados sulfonamidas y que no son bactericidas, sino bacteriostáticas, ya que inhiben el crecimiento bacteriano.

Su fórmula general es:



■ Química industrial y química de laboratorio. Cuestiones

1. Comenta cuatro diferencias existentes entre las reacciones químicas que se realizan en un laboratorio y las que se realizan en las instalaciones industriales.

Pregunta abierta. En general:

- En el laboratorio, las condiciones de la reacción son más suaves, con menor cantidad de reactivos, normalmente muy puros, y se busca el conocimiento de las características cinéticas y termoquímicas del proceso.
- En una planta química se trabaja con toneladas de reactivos, habitualmente con impurezas, en condiciones de presión y temperatura más elevadas, en procesos continuos o semicon-

tinuos, buscando reutilizar los residuos y evitando la emisión de efluentes líquidos o gaseosos al entorno. Además, el factor económico es muy importante.

2. ¿Qué se entiende por planta piloto? ¿Qué factores de un proceso químico se evalúan en ella?

Se entiende por *planta piloto* el paso intermedio entre la realización de procesos químicos en el laboratorio y su posterior realización en una planta industrial.

En general, se evalúa la viabilidad del proceso según está diseñado en el laboratorio, junto con otros aspectos que pueden ir desde el estudio de las sustancias intermedias que aparecen en la reacción general o el proceso de carga y descarga de los reactores, hasta qué hacer con las sustancias intermedias que se pueden generar en la reacción principal, dónde y cómo obtener las materias primas necesarias, cómo convertir estas materias primas en los reactivos necesarios, qué filtros conviene poner para evitar la emisión de efluentes gaseosos, etc.