



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

**Fundamentos de Química
Orgánica y Aplicaciones en
Ciencias de la Tierra**

MATERIAL DIDÁCTICO

Que para obtener el título de

INGENIERA PETROLERA

P R E S E N T A N

Yisel Anaid Animas Gómez

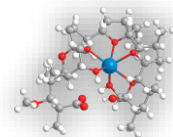
Luisa Adriana Tortolero Camacho

ASESOR DE MATERIAL DIDÁCTICO

Ing. Marco Antonio Rubio Ramos



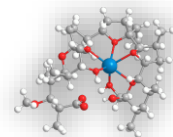
Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2017



dgapa

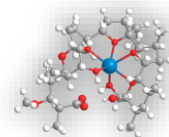
Dirección General de Asuntos
del Personal Académico

Este trabajo fue realizado con el apoyo de la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA), dentro de las actividades para la elaboración del libro: “Química para Ciencias de la Tierra: Fundamentos y Aplicaciones” para el proyecto PAPIME No.-PE103116 y gracias a la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) por el apoyo brindado por la beca adquirida a través de este proyecto PAPIME.

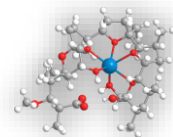


ÍNDICE

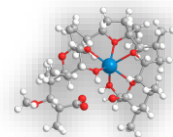
RESUMEN	1
ABSTRACT	2
INTRODUCCIÓN	3
1. QUÍMICA ORGÁNICA: FUNDAMENTOS BÁSICOS	5
1.1 Fórmula química	5
1.2 Hibridación	7
1.3 Ejercicios.....	14
2. CLASIFICACIÓN DE HIDROCARBUROS	16
2.1 Hidrocarburos Alifáticos	16
2.1.1 Hidrocarburos saturados	17
2.1.2 Hidrocarburos insaturados.....	20
2.1.3 Cíclicos	24
2.2 Hidrocarburos aromáticos	24
2.3 Ejercicios.....	25
3. ALCANOS	27
3.1 Propiedades físicas.....	27
3.2 Nomenclatura.....	29
3.2.1 Alcanos lineales.....	30
3.2.2 Alcanos ramificados	30
3.3 Reacciones	34
3.3.1 Combustión	34
3.3.2 Halogenación.....	35
3.3.3 Pirólisis	38
3.4 Cicloalcanos.....	39
3.4.1 Propiedades físicas	39
3.4.2 Nomenclatura	39
3.4.3 Isomería cis-trans	41
3.5 Ejercicios.....	42



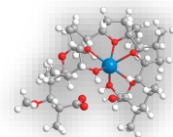
4. ALQUENOS	44
4.1 Propiedades físicas.....	44
4.2 Nomenclatura.....	45
4.2.1 Alquenos lineales	46
4.2.2 Alquenos ramificados	46
4.3 Reacciones	47
4.3.1 Hidrogenación de alquenos.....	48
4.3.2 Adición de Halógenos a alquenos	48
4.3.3 Hidratación de alquenos catalizada por ácidos	49
4.3.4 Oxidación de Alquenos.....	49
4.3.5 Polimerización	50
4.4 Cicloalquenos	50
4.4.1 Propiedades físicas	51
4.4.2 Nomenclatura	51
4.5 Ejercicios.....	52
5. ALQUINOS.....	55
5.1 Propiedades físicas.....	55
5.2 Nomenclatura.....	56
5.2.1 Alquinos lineales.....	57
5.2.2 Alquinos ramificados	57
5.3 Reacciones	58
5.3.1 Hidrogenación catalítica	59
5.3.2 Adición de Halógenos.....	59
5.3.3 Hidratación de alquinos	60
5.4 Cicloalquinos.....	60
5.4.1 Propiedades físicas	60
5.4.2 Nomenclatura	61
5.5 Ejercicios.....	62
6. HIDROCARBUROS AROMÁTICOS.....	64
6.1 Hidrocarburos aromáticos monocíclicos	65



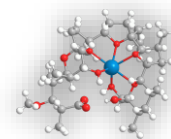
6.2 Hidrocarburos aromáticos Policíclicos	66
6.3 Hidrocarburos aromáticos Heterocíclicos.....	66
6.4 Propiedades físicas.....	67
6.5 Nomenclatura.....	67
6.6 Reacciones	69
6.6.1 Halogenación.....	69
6.6.2. Nitración	70
6.6.3. Sulfonación.....	71
6.7 Ejercicios.....	71
7. GRUPOS FUNCIONALES	74
7.1 Halogenuros de alquilo	75
7.1.1 Propiedades	76
7.1.2 Nomenclatura	76
7.2. Alcoholes	78
7.2.1 Propiedades	78
7.2.2 Nomenclatura	79
7.3 Éteres.....	82
7.3.1 Propiedades	83
7.3.2 Nomenclatura	84
7.4 Aldehídos	86
7.4.1 Propiedades	86
7.4.2 Nomenclatura	87
7.5 Cetonas.....	88
7.5.1 Propiedades	89
7.5.2 Nomenclatura	89
7.6 Ácidos carboxílicos	90
7.6.1 Propiedades	91
7.6.2 Nomenclatura	91
7.7 Ésteres.....	93
7.7.1 Propiedades	94



7.7.2 Nomenclatura	94
7.8 Aminas	95
7.8.1 Propiedades	96
7.8.2 Nomenclatura	96
7.9 Amidas	98
7.9.1 Propiedades	99
7.9.2 Nomenclatura	99
7.10 Ejercicios.....	101
8. FRACCIONAMIENTO SARA	103
8.1 Saturados.....	103
8.2 Aromáticos	104
8.3 Resinas	105
8.4 Asfaltenos	105
8.5 Métodos para realizar el análisis SARA.....	106
8.5.1 Cromatografía de capa fina con detección de ionización (TLC-FID)	107
8.5.2 Cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC, por sus siglas en inglés).....	108
8.5.3 Cromatografía por Exclusión de Tamaño (SEC)	108
8.6 Ejercicios.....	109
9. ANÁLISIS DEL PETRÓLEO POR CROMATOGRAFÍA DE GASES.....	112
9.1 Clasificación de métodos cromatográficos	113
9.2 Análisis cualitativo.....	114
9.3 Ejemplos de Cromatografía para Crudos Mexicanos.....	116
9.4 Análisis cuantitativo.....	117
9.4.1 Análisis experimental.....	118
9.4.1 Distribución Molar	120
9.5 Ejercicios.....	122
10. BIOMARCADORES	125
10.1 Biomarcadores Petroleros (Geomarcadores).....	126
10.2 Análisis de Biomarcadores.....	126



10.2.1 Separación mediante técnicas cromatográficas	127
10.2.2 Identificación por técnicas espectroscópicas	128
10.3. Rangos de diagnóstico de biomarcadores	129
10.4. Parámetros utilizados en la identificación de huellas moleculares o biomarcadores del petróleo.....	130
10.5. Importancia del estudio de Biomarcadores en la Industria Petrolera	130
10.6. Relación Dibenzotiofeno/Fenantreno y Pristano/Fitano como indicadores de ambiente de depósito y litología de rocas generadoras	131
10.7 Ejercicios.....	133
CONCLUSIONES.....	135
ANEXO I. DIAPOSITIVAS.....	137
BIBLIOGRAFÍA.....	153

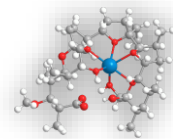


RESUMEN

Apoyar a los alumnos en sus diferentes asignaturas requiere de un dominio básico en antecedentes de Matemáticas, Física y Química, por lo que aplicar los conocimientos de estas Ciencias básicas es muy importante para lograr el buen desarrollo académico de los estudiantes de geociencias; por ello, surge la necesidad de desarrollar un libro de Química con aplicaciones para las diferentes carreras de la División de Ciencias de la Tierra, para uso de estudiantes y como apoyo documental para el personal docente.

La química orgánica es un tema con fuerte presencia en el sector energético, en especial en la industria petrolera. La extracción de hidrocarburos, la producción y petroquímica de los mismos requiere de diferentes técnicas cuya implementación tiene principios básicos de Química, desde la toma de información para conocer el subsuelo, los análisis para la caracterización de yacimientos, hasta la refinación del petróleo.

El presente trabajo consta de dos partes primordiales para poder entender, complementar y profundizar los conocimientos de Química con los que cuenta el alumno y poder aplicarlos más eficientemente. La primera parte está referida a la Química Orgánica, partiendo de la clasificación de hidrocarburos, propiedades físicas y químicas de los mismos, así como su nomenclatura; la segunda parte consiste en algunas aplicaciones de los conocimientos de química orgánica en la industria petrolera y el uso de herramientas analíticas específicas, tales como cromatografía, análisis composicional y biomarcadores del petróleo.

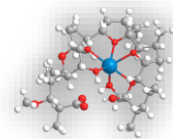


ABSTRACT

Supporting students in their different subjects requires a basic mastery of Mathematics, Physics and Chemistry, so applying the knowledge of these basic Sciences is very important to achieve good academic development of students of geosciences; for that reason, there is the need to develop a basic Chemistry book, a fundamental science that has plenty applications for all Earth Science careers.

Organic Chemistry is a very influent topic in the energetic industry, especially on petroleum engineering. Hydrocarbon extraction, production and petrochemistry demand different techniques, whose implementation involves chemistry's basic principles: from taking samples from the subsoil and analyzing them for reservoir characterization, to oil's refining process.

The following paper consists of two principal parts which tend to help the students to understand, complement and further go in depth in all their previous knowledge about chemistry and be able to apply them. The first part is mainly about Organic Chemistry, starting with hydrocarbons classification, their physic and chemical properties, as well as their naming. The second part discusses some of the appliances that Organic Chemistry has on the oil industry, as they are petroleum chromatography, composition and biomarkers analysis.



INTRODUCCIÓN

La Química Orgánica es una rama de la Química que se encarga de estudiar en su gran mayoría las moléculas que contienen átomos de Carbono e Hidrógeno, dichas moléculas así como otros elementos comunes (Oxígeno, Nitrógeno, Halógenos y Azufre) son conocidos como compuestos orgánicos.

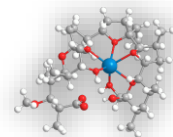
Los compuestos de origen orgánico pueden ser sintetizados químicamente para generar productos en beneficio del ser humano; sin embargo, dichos compuestos tienen su origen natural en algunos seres vivos en forma de proteínas, carbohidratos o incluso como resultado de procesos geológicos, tales como la generación del petróleo.

El petróleo es una mezcla compleja de compuestos orgánicos, principalmente de hidrocarburos, los cuales se clasifican de acuerdo a su grado de saturación, tipos de enlaces, grupos funcionales y contenido de anillos bencénicos. Las propiedades físicas y químicas de los hidrocarburos varían conforme incrementa la complejidad de la molécula, siendo uno de los principales casos de estudio en la industria petrolera.

Las reacciones químicas entre los hidrocarburos sometidos a las condiciones de presión, temperatura y que están en contacto con otros agentes, pueden causar problemas en la perforación, es por ello que en todo caso, se debe de tener conocimiento integral de las propiedades químicas de ellos, p. ej. utilizar un lodo de perforación adecuado para tener un buen control del pozo.

Para poder obtener la mayor cantidad de información posible de los fluidos de un yacimiento petrolero, es necesaria la caracterización de crudos, lo cual requiere de diversos análisis, ya sean cromatográficos (composicionales) isotópicos o de pirólisis.

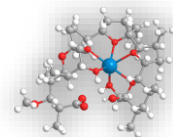
La cromatografía del petróleo es un procedimiento rutinario de análisis que separa, identifica y cuantifica los diferentes componentes de una mezcla y sirve para conocer el contenido individual y las propiedades de los compuestos contenidos en dicha mezcla;



de modo que, el uso de técnicas cromatográficas es muy usual y sirve como base para diferentes análisis composicionales, tales como el fraccionamiento SARA, el cual separa la muestra de petróleo basado en la solubilidad de los componentes de los hidrocarburos. Debido a la elevada cantidad de anillos aromáticos, la fracción más pesada de dicha prueba (los asfáltenos), representa uno de los principales problemas en la perforación y recuperación, ya que suelen originar precipitados sólidos muy densos, bloqueando las tuberías de producción y evitando el flujo de fluidos desde el yacimiento hasta superficie.

Otra forma de obtener datos más específicos de los hidrocarburos es a través del uso de biomarcadores, los cuales pueden proporcionar valiosa información acerca de fuentes biológicas de la materia orgánica sedimentaria que le dio origen, los ambientes de depósito, la madurez de la materia orgánica y edad geológica.

La mayor información posible que se pueda obtener de las pruebas y análisis de los crudos, será de utilidad para tener el menor rango de incertidumbre en la ocurrencia de problemas que afecten la perforación y producción de pozos petroleros.



1. QUÍMICA ORGÁNICA: FUNDAMENTOS BÁSICOS

La Química Orgánica se ha definido, histórica y formalmente, como “la Química de los compuestos del carbono”, ya que estudia la estructura, síntesis, propiedades y reactividad de compuestos formados principalmente por carbono e hidrógeno, aunque los productos de origen biogénico pueden contener otros elementos, tales como oxígeno, azufre, nitrógeno, halógenos, fósforo y silicio.

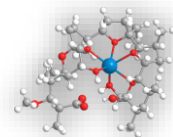
Las moléculas orgánicas son conjuntos de átomos ordenados que están unidos mediante enlaces predominantemente covalentes. Presentan un “esqueleto” de átomos de carbono enlazados entre sí que forman lo que se llama “cadena carbonada”.

En 1807 el concepto de “Química Orgánica” fue introducido por Jons Jacob Berzelus como parte de sus estudios de los compuestos derivados de los recursos naturales, en donde se consideraba que, a diferencia de los compuestos inorgánicos, era imposible la preparación o síntesis de un compuesto orgánico en laboratorio.

Sin embargo, esta “suposición” fue sustituida en 1823 por Friedrich Wohler al observar como la evaporación de un compuesto inorgánico (cianato de amonio) formaba cristales que no pertenecían a dicho compuesto y que, tras un análisis, se confirmó que se trataba de una molécula orgánica (urea); concluyendo así, que los compuestos orgánicos también se pueden sintetizar en laboratorio, existiendo incluso una gran cantidad de los mismos.

1.1 Fórmula química

La fórmula química es la forma de escribir una molécula, y debe contener la información de qué elementos constituyen el compuesto y en qué proporción se encuentran dichos elementos. Las diferentes maneras de representar una fórmula química son:



a) **Empírica:** Es la fórmula más simple posible. Indica qué elementos forman la molécula y en qué proporción están. Es la fórmula que se obtiene a partir de la composición centesimal de un compuesto como se indica a continuación:



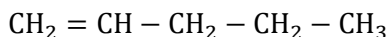
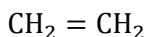
Compuesto formado por carbono e hidrogeno, en la proporción 1 a 1

b) **Molecular:** La fórmula molecular indica el número total de átomos de cada elemento en la molécula. Para conocer la fórmula molecular a partir de la empírica es preciso conocer la masa molecular del compuesto. Hay tres formas distintas de escribir una fórmula molecular:

➤ **Condensada:** Expresa el tipo y número de átomos de la molécula, pero no informa de los enlaces que presenta la misma, por ejemplo butano:



➤ **Semidesarrollada:** En ella se representa sólo los enlaces carbono-carbono, por ejemplo etileno y penteno, que se expresa de la siguiente manera:



➤ **Desarrollada:** Se representan todos los enlaces de la molécula por ejemplo metano y propino (**Figura 1**):

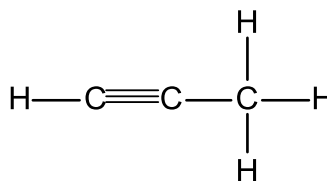
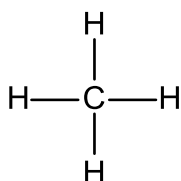
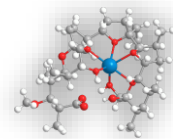


Figura 1. Ejemplos de fórmula desarrollada



c) **Fórmula Geométrica:** La fórmula geométrica indica la distribución de los átomos en el plano o en el espacio:

- Plana: En este tipo de fórmulas no aparecen los átomos de carbono ni los de hidrógeno. Los átomos de carbono se representan como los vértices y terminaciones de segmentos de línea, y si se tienen grupos radicales (R), éstos deberán escribirse de modo explícito, por ejemplo hexano y 2 metil pentano (**Figura 2**).



Figura 2. Formula plana.

- Tridimensional: Como su nombre lo dice, estas fórmulas muestran adecuadamente una representación tridimensional del orden o distribución de los átomos en la molécula. Requieren el empleo de diagramas con perspectiva (3D), la indicación de ángulos y distancias de enlace, por ejemplo eteno (**Figura 3**).

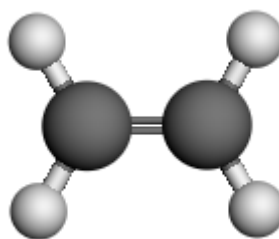
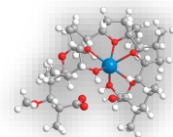


Figura 3. Formula geométrica del eteno.

1.2 Hibridación

La hibridación de orbitales es un procedimiento que implica la combinación de las funciones de onda individuales para los orbitales atómicos (puros) s y p a fin de obtener



funciones de onda para los nuevos orbitales atómicos híbridos con diferentes formas y orientaciones.

Una de las reglas que rige la hibridación es que se forman tantos orbitales híbridos como orbitales se combinaron; y todos los híbridos resultantes tienen igual energía, por lo que se dice que son equivalentes. Otra regla del llenado de los orbitales híbridos, es que los electrones se distribuyan de manera que haya el mayor número posible de electrones desapareados.

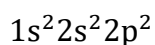
En química se considera apareamiento y desapareamiento a la probabilidad de que las cargas eléctricas pertenecientes a campos eléctricos opuestos puedan unirse.

Ejemplo:

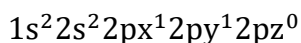
El elemento carbono (C) tiene un N° atómico 6 y una masa de 12 (su núcleo tiene 6 protones y 6 neutrones) y está rodeado por 6 electrones distribuidos de la siguiente forma:

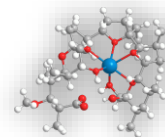
- dos en el nivel $1s$
- dos en el nivel $2s$
- dos en el nivel $2p$

Su configuración electrónica en su estado natural es:



Los suborbitales p son tres, tienen igual energía pero diferente orientación espacial y son mutuamente perpendiculares entre sí. Teniendo esto en cuenta, la configuración electrónica del carbono es:





Los electrones se comportan como si giraran alrededor de su eje, generando un pequeño campo magnético. Si los campos de dos electrones son opuestos, entonces se pueden aparear.

Representaremos a los electrones y campos magnéticos mediante medias flechas verticales. A cada orbital s , o a cada parte de orbital p (llamada “lóbulo”) se asigna un signo + o – correspondiente a la función matemática que lo define.

Cuando se hibridan los orbitales, las zonas de igual signo se suman y si los signos son diferentes se restan, lo que confiere a los orbitales híbridos una peculiar “forma”, con un lóbulo grande y uno pequeño (**Figura 4**).

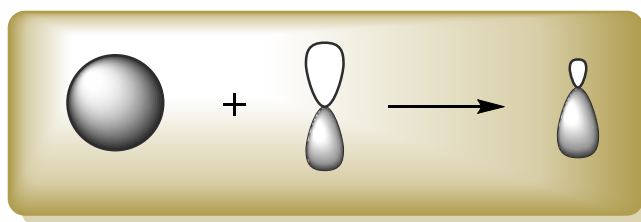


Figura 4. Proceso de hibridación entre un orbital s y un orbital p .

a) Hibridación sp^3

Se combinan los orbitales $2s$, $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$ con lo cual se obtienen 4 orbitales híbridos constituidos por 1 parte del orbital s y 3 partes del orbital p , por eso es que recibe el nombre de sp^3 (**Figura 5**).

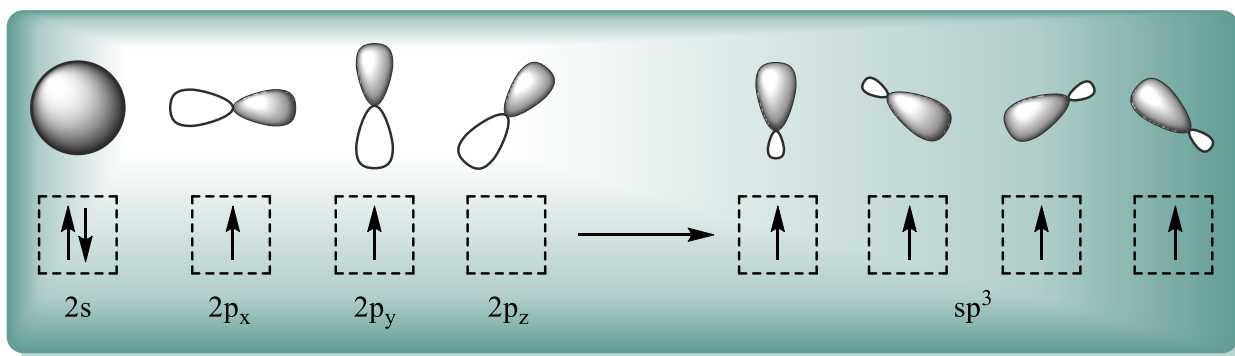
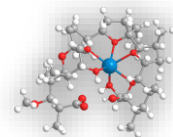


Figura 5. Hibridación sp^3



Los cuatro orbitales sp^3 son equivalentes, por eso se disponen igualmente separados, partiendo del núcleo del carbono, hacia cada uno de los vértices de un tetraedro regular, en cuyo centro está el núcleo (**Figura 6**).

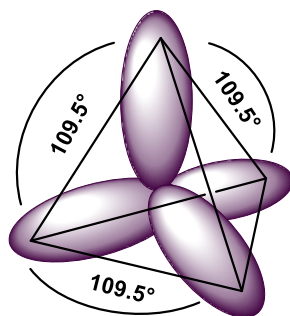


Figura 6. Cuatro orbitales sp^3

b) Hibridación sp^2

Se combinan tres orbitales: $2s$, $2p_x$ y $2p_y$, con lo cual se obtienen 3 orbitales híbridos constituidos por 1 parte de orbital s y 2 partes de orbitales p ; y nos queda el orbital $2p_z$ sin combinar (**Figura 7**).

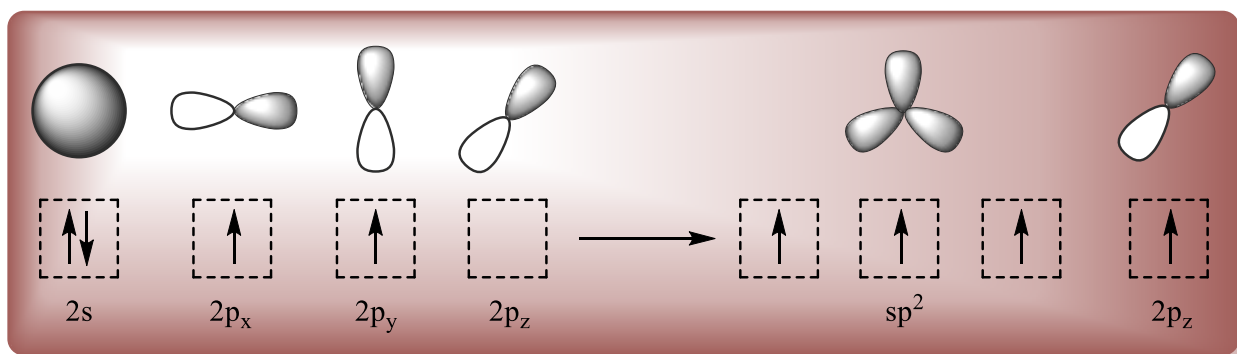


Figura 7. Hibridación sp^2

Los tres orbitales sp^2 son equivalentes, por lo que se disponen, a partir del núcleo del Carbono, hacia cada uno de los vértices de un triángulo equilátero, en cuyo centro está el núcleo (**Figura 8**).

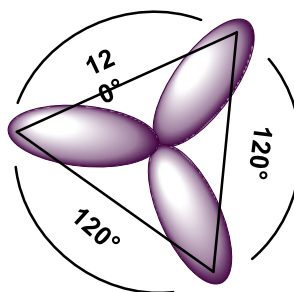
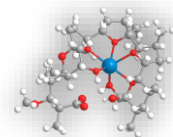


Figura 8. Cuatro orbitales sp^3

c) Hibridación sp .

Se combinan los orbitales $2s$ y $2p_x$, con lo cual se obtienen 2 orbitales híbridos constituidos por 1 parte de orbital s y 1 parte de orbitales p , quedando los orbitales $2p_y$ y $2p_z$ sin combinar, mientras tanto en forma perpendicular al conjunto de orbitales sp^2 se desarrolla el orbital p_z no combinado (**Figura 9**).

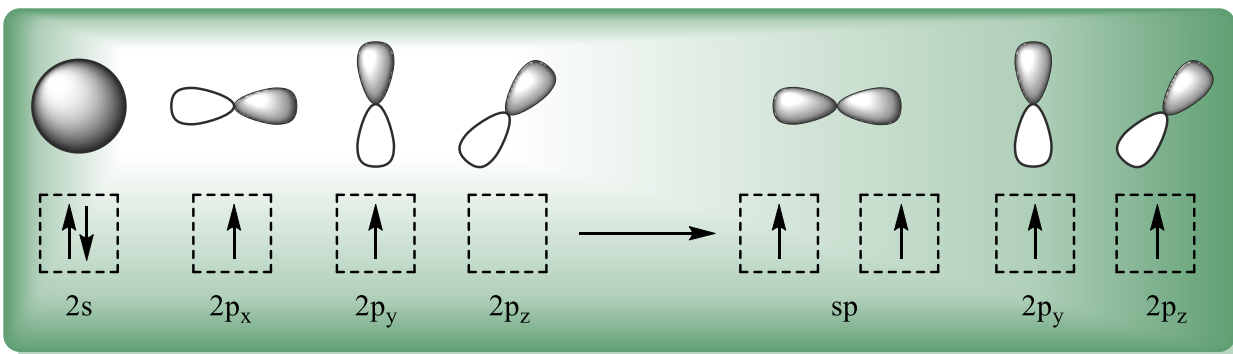


Figura 9. Hibridación sp

Los dos orbitales sp son equivalentes, por lo que se disponen a partir del núcleo del Carbono, hacia cada uno de los sentidos sobre una recta, en cuyo origen está el núcleo; mientras tanto, en forma perpendicular al conjunto de orbitales sp , se desarrollan ambos orbitales p no combinados (**Figura 10**).

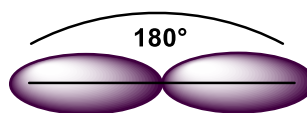
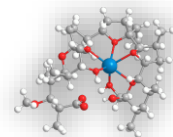


Figura 10. Orbitales sp



De acuerdo al tipo de orbitales y su orientación, las uniones químicas se clasifican como:

- Enlace sigma (σ).- El enlace sigma es un tipo de enlace covalente, que se forma por hibridación de orbitales atómicos.

El enlace sigma puede formarse como producto de la hibridación de dos orbitales s , un orbital s y uno p , o dos orbitales p que se hibridan lateralmente (**Figura 11**).

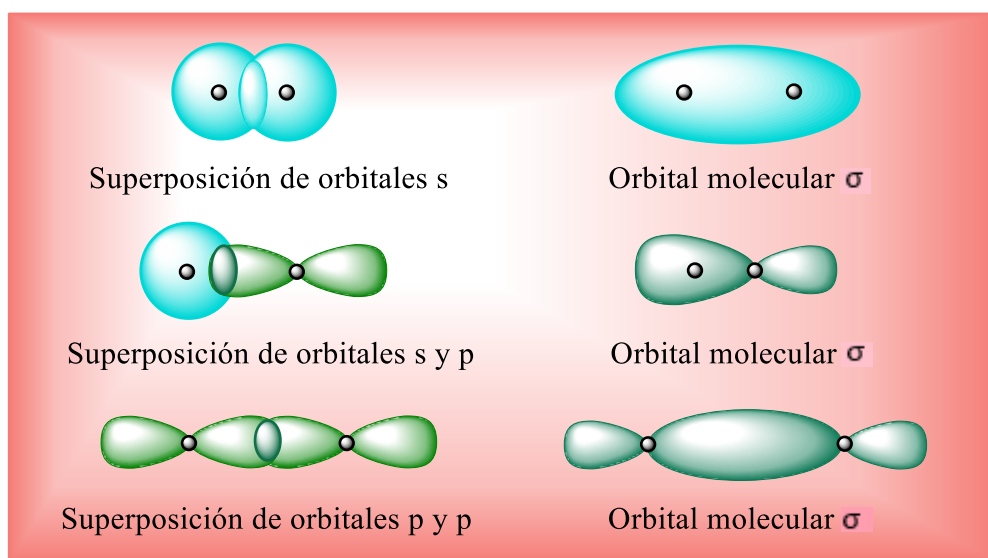


Figura 11. Enlaces σ

- Enlace pi (π).- El enlace pi (π) es un enlace covalente formado por la hibridación de dos orbitales atómicos p . Los orbitales d también pueden participar en este tipo de enlace.

Este enlace no posee tanta energía como el enlace sigma, dado que los electrones que los forman se encuentran más alejados del núcleo, y por eso la fuerza de atracción entre los electrones y el núcleo es menor (**Figura 12**).

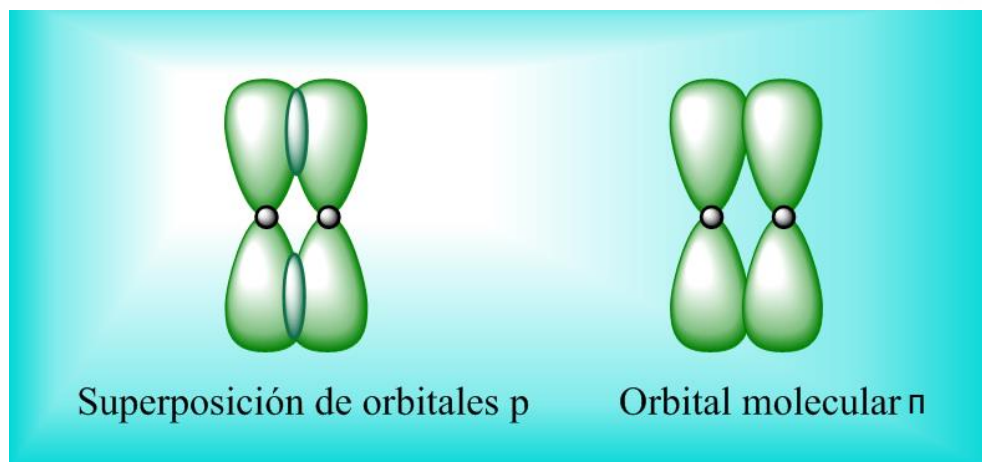
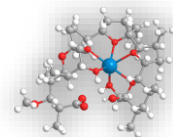
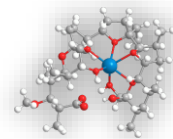


Figura 12. Enlace π

En resumen, las características más representativas de la hibridación del carbono se presentan a continuación (**Tabla 1**):

Tabla 1. Hibridación el carbono.

Hibridación	Tipo de enlaces	Orbitales moleculares	Ángulo de enlace	Geometría molecular	Familia de Hidrocarburo
sp^3	Simple	σ	109.5°	Tetraédrica	Alcanos
sp^2	Doble	1σ y 1π	120°	Plana Trigonal	Alquenos
sp	Triple	1σ y 2π	180°	Lineal	Alquinos



1.3 Ejercicios

1. ¿Cuál de las siguientes fórmulas representa la fórmula molecular?

- Plana Empírica Condensada

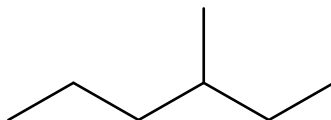
2. ¿Qué fórmula química representa solo los enlaces carbono-carbono de la molécula?

- Molecular Semidesarrollada Tridimensional

3. ¿De cuál fórmula química forma parte la fórmula tridimensional?

- Empírica Geométrica Desarrollada

4. ¿A qué fórmula pertenece la siguiente molécula?



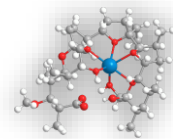
- Condensada Desarrollada Plana

5. ¿Qué tipo de hibridación le corresponde a los alquinos?

- sp sp² sp³

6. ¿Qué tipo de hibridación tiene el eteno?

- sp sp² sp³



7. ¿A qué enlace pertenece la hibridación lateral de dos orbitales p?

π

sp^2

σ

8. ¿Cuál es la geometría molecular y el ángulo de enlace de la hibridación sp ?

Lineal y 120°

Tetraédrica y 180°

Lineal y 180°

9. ¿Cuántos enlaces pi y sigma contiene el eteno?

1 π y 1 σ

2 π y 1 σ

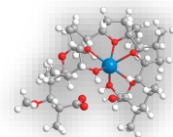
1 π y 2 σ

10. ¿Cuáles y cuántos son los orbitales atómicos que intervienen en el enlace pi?

1 orbital p

2 orbitales p

1 orbital s



2. CLASIFICACIÓN DE HIDROCARBUROS

Los hidrocarburos son los compuestos fundamentales de la Química Orgánica debido a que son moléculas orgánicas formadas únicamente por átomos de carbono e hidrógeno. Estos átomos de carbono tienen la capacidad de enlazarse entre sí, dando lugar a la formación de cadenas lineales, cíclicas o ramificadas. Los hidrocarburos se clasifican, en forma general, de la siguiente manera (**Figura 13**).

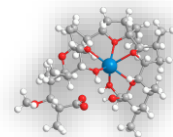


Figura 13. Clasificación de hidrocarburos

2.1 Hidrocarburos Alifáticos

Los hidrocarburos alifáticos pueden ser de cadena abierta o cadena cerrada. Los de cadena abierta se dividen en alcanos, alquenos y alquinos, mientras que los de cadena cerrada se dividen en cicloalcanos, cicloalquenos y cicloalquinos.

La cadena abierta representa a los átomos de carbono que están unidos entre sí de forma lineal o cíclica y pueden ser:



- a) Cadena lineal.- Los átomos de carbono pueden escribirse en línea recta o en forma tipo zig-zag (**Figura 14**).

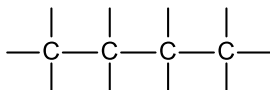


Figura 14. Molécula de butano (C₄H₁₀)

- b) Cadena lineal ramificada.- Son aquellos donde de alguno de los carbonos principales de la cadena lineal sale otra u otras cadenas secundarias o ramas (**Figura 15**).

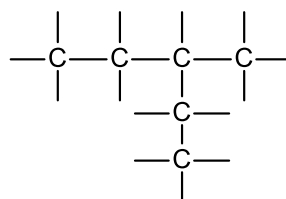


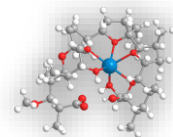
Figura 15. Molécula 3 metil pentano (C₆H₁₄)

En los hidrocarburos de cadena cerrada, el último carbono de la cadena se une al primero, formando estructuralmente un ciclo o anillo. Existen varios tipos de estos compuestos:

- a) Homocíclica.- los átomos del ciclo son exclusivamente átomos de carbono.
- b) Heterocíclica.- algún átomo de carbono del ciclo fue substituido por otro átomo, por ejemplo, N, S, O, etc.
- c) Monocíclico.- solo hay un ciclo.
- d) Policíclica.- hay varios ciclos unidos.

2.1.1 Hidrocarburos saturados

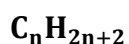
Los hidrocarburos saturados también llamados alcanos o parafinas son aquellos compuestos que tienen el máximo de átomos de hidrógeno en su estructura molecular,



es decir todos sus enlaces posibles están saturados con átomos de hidrógeno. Los hidrocarburos lineales solamente presentan enlaces sencillos: C-C ó C-H.

Familia homóloga de los alcanos

La serie homóloga se refiere a una serie de compuestos saturados, sin ramificaciones y que difieren únicamente en el número de grupos CH₂. Cada uno de los miembros individuales de la serie se le conoce como homólogos. En una serie homóloga las propiedades físicas varían de forma continua, tanto los puntos de fusión como los de ebullición van aumentando a medida que incrementa el número de carbonos y por tanto el peso molecular del compuesto. La fórmula general de los alcanos es:

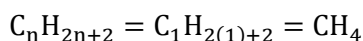


n = número de átomos de Carbono

Ejemplo:

Calcular el peso molecular de la serie homóloga de los alcanos.

Metano:



Con los átomos de carbono e hidrógeno y las masas de los mismos, se calcula el peso molecular del metano.

$$\begin{aligned} C &= 12 \text{ uma} \\ H &= 1 \text{ uma} \\ C &= (12)(1) = 12 \text{ uma} \\ H &= (1)(4) = 4 \text{ uma} \\ PM &= 12 + 4 = 16 \text{ uma} \end{aligned}$$

A continuación se muestran los pesos moleculares para los diez primeros compuestos de la serie homóloga de los alcanos, así como su fórmula estructural (**Tabla 2**).

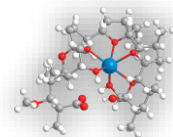
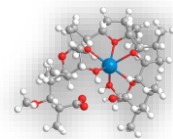


Tabla 2. Peso molecular de hidrocarburos lineales saturados.

Nombre	Fórmula Molecular (C _n H _{2n+2})	Peso Molecular (uma)	Fórmula Semidesarrollada
Metano	CH ₄	16	CH ₄
Etano	C ₂ H ₆	30	CH ₃ - CH ₃
Propano	C ₃ H ₈	44	CH ₃ - CH ₂ - CH ₃
Butano	C ₄ H ₁₀	58	CH ₃ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₃
Pentano	C ₅ H ₁₂	72	CH ₃ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₃
Hexano	C ₆ H ₁₄	86	CH ₃ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₃
Heptano	C ₇ H ₁₆	100	CH ₃ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₃
Octano	C ₈ H ₁₈	114	CH ₃ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₃
Nonano	C ₉ H ₂₀	128	CH ₃ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₃
Decano	C ₁₀ H ₂₂	142	CH ₃ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₃

Notar que la diferencia entre cada uno de los miembros de la serie homóloga es de 14 uma, esta diferencia en peso es equivalente a una molécula CH₂. Por ejemplo, la diferencia entre octano y heptano será: 114-100=14; y entre octano y hexano será de 2CH₂, es decir 28 uma.



2.1.2 Hidrocarburos insaturados

Los hidrocarburos insaturados son aquellos compuestos químicos que poseen enlaces de tipo doble o triple entre los átomos de carbono que constituyen la molécula. Esto es debido a que los átomos de carbono, al unirse entre sí con enlaces múltiples, agotan las posibilidades de enlazarse con un átomo de hidrógeno. La cantidad de átomos de hidrógeno que tienen los hidrocarburos insaturados es siempre menor a la de los saturados pero con igual número de átomos de carbono en su estructura. Los hidrocarburos insaturados se subdividen en Alquenos y Alquinos.

Alquenos

Los alquenos u olefinas, son hidrocarburos insaturados que se caracterizan por presentar en su estructura uno o más dobles enlaces carbono-carbono ($C = C$). Dado que existen compuestos insaturados consecutivos dependiendo del número de átomos de carbono, se definen también como una serie de compuestos insaturados. A los miembros individuales de la serie se les da, por convención, la terminación es “eno”.

Al tener una doble ligadura hay dos átomos menos de hidrógeno, por lo tanto, la fórmula general es:



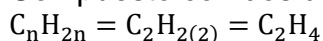
n = número de átomos de Carbono

Ejemplo:

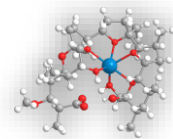
Calcular el peso molecular de la serie homóloga de los alquenos utilizando la fórmula molecular.

Eteno:

Compuesto con dos átomos de carbono.



Sustituyendo las masas de carbono e hidrógeno.



$$C = (12)(2) = 24 \text{ uma}$$

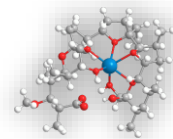
$$H = (1)(4) = 4 \text{ uma}$$

$$PM = 24 + 4 = 28 \text{ uma}$$

Los pesos moleculares para los primeros diez alquenos de la serie se muestran a continuación (**Tabla 3**).

Tabla 3. Peso molecular de hidrocarburos insaturados con enlace doble.

Nombre	Fórmula Molecular (C _n H _{2n})	Peso Molecular (uma)	Fórmula Semidesarrollada
Eteno	C ₂ H ₄	28	$\text{CH}_3 = \text{CH}_3$
Propeno	C ₃ H ₆	42	$\text{CH}_3 = \text{CH}_2 - \text{CH}_3$
Buteno	C ₄ H ₈	56	$\text{CH}_3 = \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$
Penteno	C ₅ H ₁₀	70	$\text{CH}_3 = \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$
Hexeno	C ₆ H ₁₂	84	$\text{CH}_3 = \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$
Hepteno	C ₇ H ₁₄	98	$\text{CH}_3 = \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$
Octeno	C ₈ H ₁₆	112	$\text{CH}_3 = \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$
Noneno	C ₉ H ₁₈	126	$\text{CH}_3 = \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$
Deceno	C ₁₀ H ₂₀	140	$\text{CH}_3 = \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$

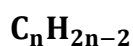


Alquinos

Son hidrocarburos insaturados que se caracterizan por presentar uno o más enlaces triples en la estructura carbono-carbono ($C \equiv C$).

El más sencillo de todos estos compuestos es el acetileno ($H - C \equiv C - H$), utilizado en la elaboración de polímeros acrílicos o como el gas que se utiliza como combustible en los sopletes a altas temperaturas.

El grado de insaturación de los alquinos es dos respecto a los alquenos y cuatro respecto a los alcanos, siendo por tanto su fórmula general:



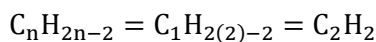
n = número de átomos de Carbono

Ejemplo:

Calcular el peso molecular de la serie homóloga de los alquinos utilizando la fórmula molecular.

Etino (acetileno):

Compuesto con un átomo de carbono.



Sustituyendo las masas de carbono e hidrógeno.

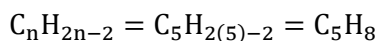
$$C = (12)(2) = 24 \text{ lbm}$$

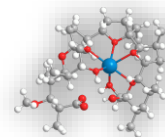
$$H = (1)(2) = 2 \text{ lbm}$$

$$PM = 24 + 2 = 26 \text{ lbm}$$

Pentino:

Compuesto con cinco átomos de carbono.





$$C = (12)(5) = 60 \text{ lbm}$$

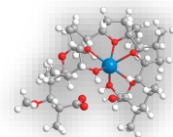
$$H = (1)(8) = 8 \text{ lbm}$$

$$PM = 60 + 8 = 68 \text{ lbm}$$

Los pesos moleculares para los alquinos se muestran a continuación (**Tabla 4**).

Tabla 4. Peso molecular de hidrocarburos insaturados con enlace triple.

Nombre	Fórmula Molecular (C _n H _{2n-2})	Peso Molecular (uma)	Fórmula Semidesarrollada
Etino	C ₂ H ₂	24	$CH_3 = CH_3$
Propino	C ₃ H ₄	40	$CH_3 = CH_2 - CH_3$
Butino	C ₄ H ₆	54	$CH_3 = CH_2 - CH_2 - CH_3$
Pentino	C ₅ H ₈	68	$CH_3 = CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_3$
Hexino	C ₆ H ₁₀	82	$CH_3 = CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_3$
Heptino	C ₇ H ₁₂	96	$CH_3 = CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_3$
Octino	C ₈ H ₁₄	110	$CH_3 = CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_3$
Nonino	C ₉ H ₁₆	124	$CH_3 = CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_3$
Decino	C ₁₀ H ₁₈	138	$CH_3 = CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_3$



2.1.3 Cíclicos

Los hidrocarburos cíclicos son aquellos que contienen una cadena cerrada y suelen ser representados por polígonos, donde cada vértice del polígono indica un átomo de carbono. Los hidrocarburos cíclicos se clasifican de la siguiente manera (**Figura 16**):

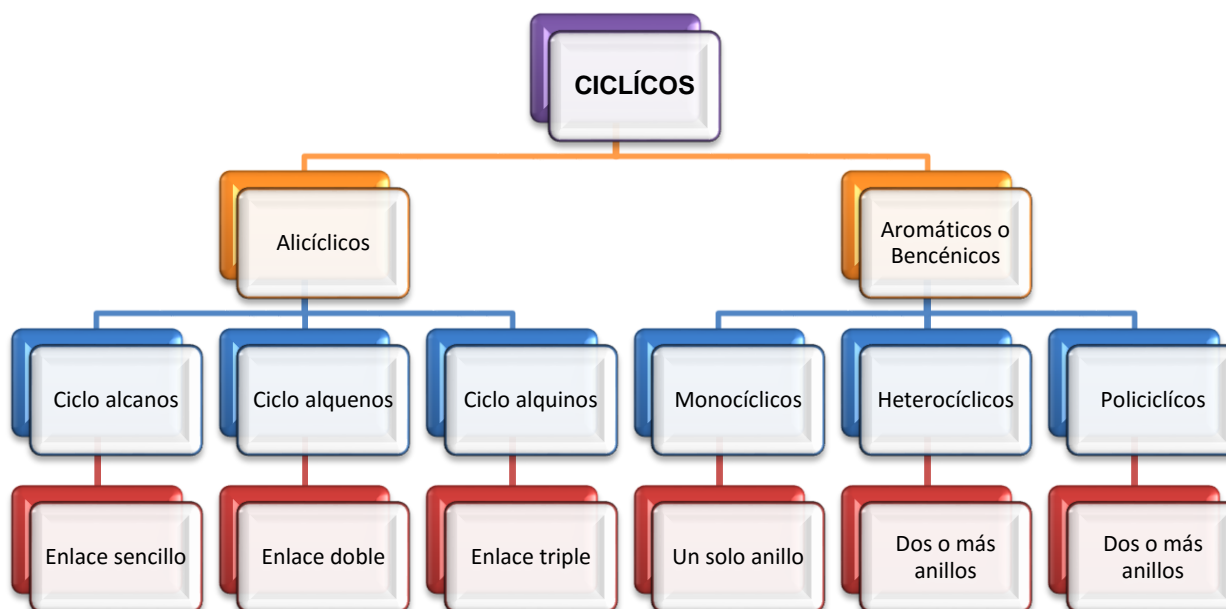


Figura 16. Clasificación de los Hidrocarburos cíclicos.

Las propiedades físicas de los hidrocarburos cíclicos son muy parecidas a los correspondientes de cadena abierta, pero la diferencia principal se encuentra en que sus respectivos puntos de ebullición y densidades son más elevadas.

El ciclo más abundante es el ciclohexano, formado por una cadena simple cerrada de 6 átomos de carbono unidos entre sí mediante enlaces simples.

2.2 Hidrocarburos aromáticos

Los hidrocarburos aromáticos son aquellos que en su estructura poseen por lo menos un anillo bencénico. Constituyen un grupo especial de compuestos cíclicos que contienen en general anillos de seis átomos de carbono y en los cuales se alternan enlaces sencillos y dobles (**Figura 17**).

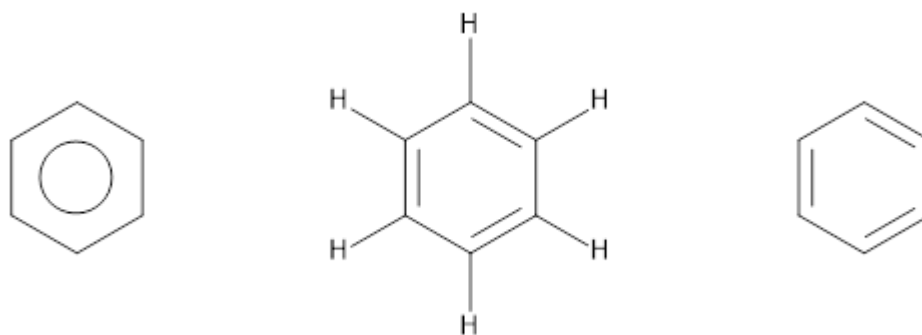
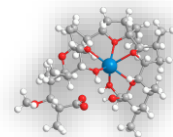


Figura 17. Diferentes formas de esquematisar el anillo unitario bencénico.

2.3 Ejercicios

1. ¿Cuál de los siguientes es un hidrocarburo alifático de cadena cerrada?

Propino

Ciclobutano

Benceno

2. ¿Qué tipo de hidrocarburos son el pentino, deceno y cicloheptano?

Alifáticos

Saturados

Aromáticos

3. ¿Qué enlace caracteriza a los alquenos?

Triple

Doble

Sencillo

4. ¿Cuál de los siguientes compuestos es un hidrocarburo saturado?

Nonano

Butino

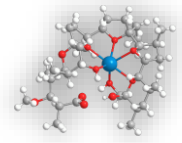
Cicloocteno

5. ¿De qué otra manera se les llama a los alcanos?

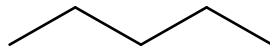
Olefinas

Insaturados

Parafinas



6. ¿Qué cadena representa la siguiente molécula?



Ramificada

Cerrada

Lineal

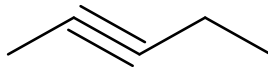
7. ¿Cuál es el peso molecular del $C_{11}H_{24}$?

72

156

184

8. ¿Cuál es el peso molecular del siguiente compuesto?

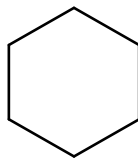


68

138

24

9. ¿Qué tipo de hidrocarburo representa la siguiente figura?



Aromático

Alicíclico

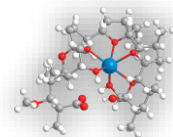
Insaturado

10. ¿Cuál es el nombre de los hidrocarburos compuestos por varios ciclos sin ningún sustituyente?

Monocíclicos

Policíclicos

Homocíclicos



3. ALCANOS

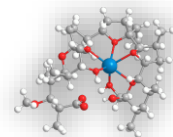
Los alcanos son los hidrocarburos más abundantes en un petróleo y también los más sencillos estructuralmente, no tienen grupo funcional asociado y las uniones entre átomos de carbono (hibridación sp^3) son siempre enlaces simples. A pesar de ello constituyen una de las fuentes de energía más importantes, el petróleo y sus derivados.

3.1 Propiedades físicas

Las propiedades fisicoquímicas de los alcanos dependen de su composición y estructura: sus moléculas presentan enlaces covalentes y están constituidos por elementos que poseen electronegatividades relativamente iguales. Esto hace que las moléculas de los alcanos sean "*esencialmente*" no polares.

Las fuerzas que mantienen unidas a las moléculas no polares (fuerzas de Van der Waals) son débiles, de alcance limitado y actúan principalmente en las superficies moleculares donde las moléculas tienen mayor contacto; por lo que, mientras más grande sea una molécula, las fuerzas intermoleculares son más intensas, incidiendo así en algunas propiedades físicas. Como convención, se acostumbra escribir a los alcanos lineales con una "*n*" (normal) antes del nombre del miembro de la serie, por ejemplo, *n*-octano, *n*-decano, etc.

- Estado físico: Bajo condiciones estándar, los alcanos desde el CH_4 hasta el C_4H_{10} son gases; desde el C_5H_{12} hasta $C_{17}H_{36}$ son líquidos; y los posteriores a $C_{18}H_{38}$ son sólidos.
- Punto de ebullición: El punto de ebullición de los alcanos está determinado principalmente por el peso molecular, por lo que al incrementar el peso molecular también aumenta el punto de ebullición de cada miembro de la serie, conservando una tendencia casi lineal.



Un alcano de cadena lineal tendrá un mayor punto de ebullición que un alcano de cadena ramificada, debido a la mayor área de la superficie de contacto, con lo que hay mayores fuerzas de van der Waals entre moléculas adyacentes.

- Punto de fusión: El punto de fusión aumenta a medida que crece el peso molecular. Este aumento no es tan geométrico, debido a que los alcanos con número par de átomos de carbono (p. ej. C_2 , C_4 , C_6 ,...) se compactan en el estado cristalino, provocando que las fuerzas de atracción entre las cadenas individuales sean mayores y, por consiguiente, los puntos de fusión lo sean también.

Los alcanos sólidos son materiales blandos de textura cristalina, generalmente de más elevado punto de fusión. Lo compacto o la simetría molecular ordinariamente aumenta el punto de fusión de un compuesto. En consecuencia, generalmente los puntos de fusión son más altos para compuestos altamente ramificados que para compuestos con una cadena más larga y recta.

- Densidad: La densidad de los alcanos aumenta conforme aumenta el número de átomos de carbono, pero permanece generalmente inferior a la del agua (1 gr/cm^3).
- Solubilidad: Los alcanos debido a su baja polaridad son insolubles en agua y solo se disuelven en solventes orgánicos no polares como *n*-heptano, *n*-heptano, etanol, etc.
- Conductividad: Son malos conductores de electricidad y no se polarizan sustancialmente por un campo eléctrico.

La **Tabla 5** muestra los puntos de ebullición, fusión y densidad de los primeros 10 componentes de la serie homóloga de los alcanos.

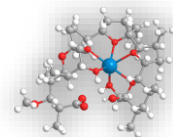


Tabla 5. Propiedades físicas de los primeros n-alcenos.

Alcano	Punto de ebullición (°C)	Punto de fusión (°C)	Densidad
Metano	-162	-183	--
Etano	-88.5	-172	--
Propano	-42	-187	--
Butano	0	-138	--
Pentano	36	-130	0.626
Hexano	69	-95	0.659
Heptano	98	-90.5	0.684
Octano	126	-57	0.703
Nonano	151	-54	0.718
Decano	174	-30	0.730

Al graficar los puntos de ebullición y fusión anteriores podemos observar el incremento de dichos valores conforme aumenta el número de átomos de carbono (**Figura 18**).

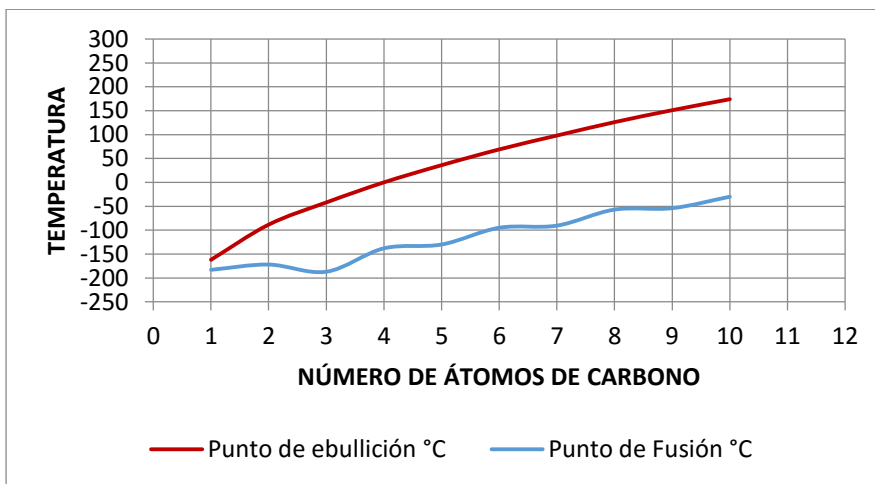
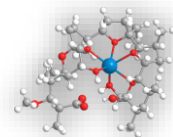


Figura 18. Comportamiento de los puntos de ebullición y fusión de los n-alcenos de acuerdo al número de átomos de carbono para compuestos individuales de la familia homóloga.

3.2 Nomenclatura

Para nombrar a los compuestos orgánicos se usa una nomenclatura sistemática e internacionalmente aceptada, IUPAC (Unión Internacional de Química Pura y Aplicada). En este sistema de nomenclatura un nombre está formado por tres partes: prefijos, principal y sufijos (**Tabla 6**). Los prefijos indican los sustituyentes de la molécula; el



sufijo indica el grupo funcional de la molécula; y la parte principal el número de carbonos que posee.

3.2.1 Alcanos lineales

Para nombrar a los alcanos lineales, se enumeran los carbonos de la molécula para determinar el prefijo adecuado que le corresponda e indique la cantidad de átomos de carbonos con la terminación “ano” (**Tabla 6**), por ejemplo (**Figura 19**):

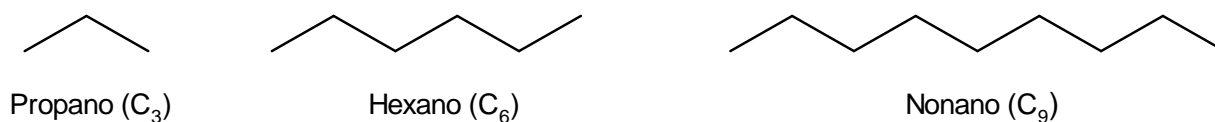


Figura 19. Ejemplos de nomenclatura de alcanos lineales

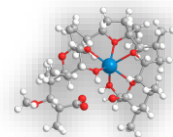
Tabla 6. Prefijos de acuerdo al número de átomos para los primeros miembros de la familia homóloga.

Número de átomos de carbono	Prefijos	Nombre
1	Met	Metano
2	Et	Etano
3	Prop	Propano
4	But	Butano
5	Pent	Pentano
6	Hex	Hexano
7	Hept	Heptano
8	Oct	Octano
9	Non	Nonano
10	Dec	Decano
11	Undec	Undecano

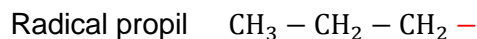
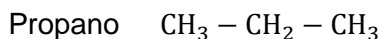
3.2.2 Alcanos ramificados

Para nombrar a los alcanos ramificados se requiere conocer a los radicales (R) alquilo que pudiesen estar ligados a la molécula principal.

Un radical alquilo es un sustituyente en la estructura generado por la separación o desprendimiento de un átomo de hidrógeno de un hidrocarburo saturado (o alcano),



para que así éste pueda enlazarse a otro átomo o grupo de átomos. Los sustituyentes alquilo se designan reemplazando el sufijo *ano* por “*il*” o “*ilo*”. Por ejemplo:



Las reglas a seguir para nombrar los alcanos de cadena ramificada (IUPAC) son:

- 1. Elegir la cadena principal:** La cadena principal es aquella que presenta el mayor número consecutivo de átomos de carbono (**Figura 20**). En el caso de existir varias cadenas con la misma longitud, se elige aquella que tenga más ramificaciones, por ejemplo en las estructuras siguientes:

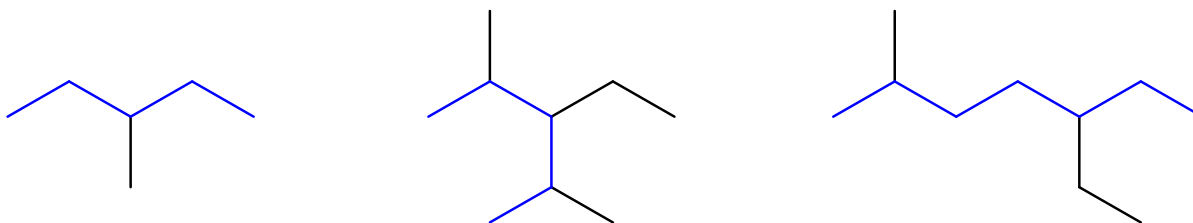


Figura 20. Cadena más larga

Donde, para los primeros dos casos la cadena más larga de átomos de carbono es de 5, mientras que para la tercera es de 7.

- 2. Numerar la cadena principal:** Empezando por un extremo a cada átomo de carbono de la cadena principal se le asigna un número (localizador) de forma que las ramificaciones (radicales) queden en los números más bajos (**Figura 21**). En el caso de tener varias posibilidades se elige la opción en la que los nombres de los radicales ordenados alfabéticamente tengan el menor localizador.

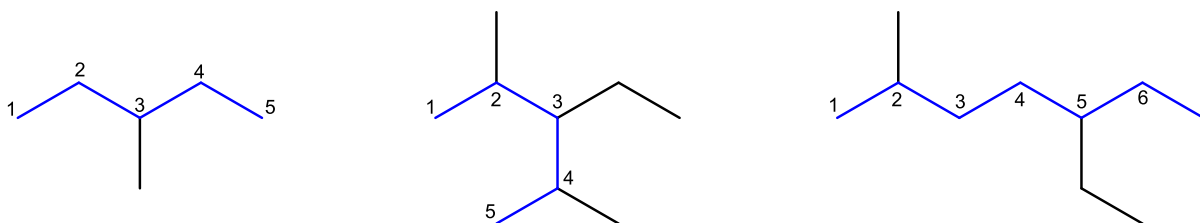
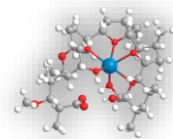


Figura 21. Numeración de la cadena más larga



Para el último caso, si se numera de izquierda a derecha los radicales están en las posiciones 2 y 5 mientras que si se numera de derecha a izquierda los radicales están en las posiciones 3 y 6, por tanto se escoge la primera opción ya que los numerales son más bajos.

3. Nombrar el compuesto: Se nombra cada radical por orden alfabético y se separan con guiones, si existe más de un radical con el mismo nombre se añade el prefijo que indica el número de veces que se repite di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta- ... (2, 3, 4, 5, 6, 7, ...).

Una vez nombrados los radicales indicamos delante de cada radical su localizador, en el caso de tener varios radicales del mismo tipo se separan por comas. Por último se añade la cadena principal como si fuera un alcano de cadena lineal (**Figura 22**).

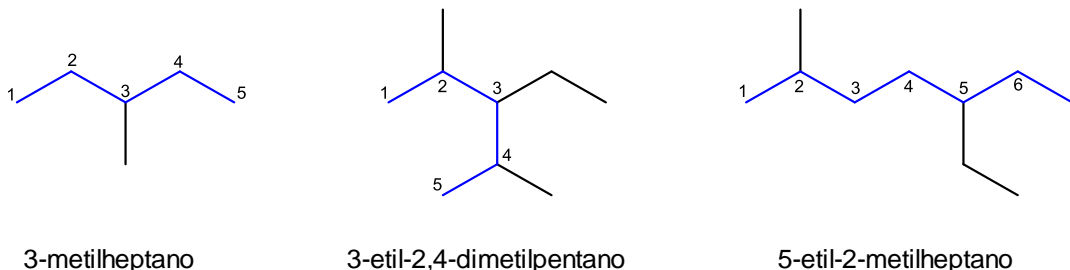
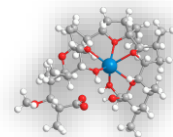


Figura 22. Nombre de algunos compuestos ramificados simples siguiendo la nomenclatura IUPAC.

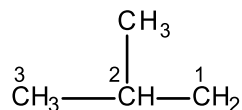
En la nomenclatura IUPAC se aceptan los siguientes nombres especiales para grupos alquilo ramificados.

Los prefijos iso-, sec-, terc- y neo- se utilizan frecuentemente para nombrar los radicales alquílicos complejos (**Figura 23**), donde:

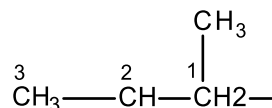
- ❖ Iso: un grupo metilo en el penúltimo carbono del radical.
- ❖ Sec: un grupo metilo sobre el carbono de valencia libre del radical.



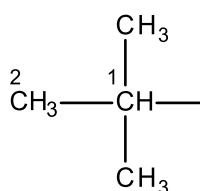
- ❖ Terc: dos grupos metilos sobre el carbono de valencia libre del radical.
- ❖ Neo: dos grupos metilos sobre el segundo carbono del radical.



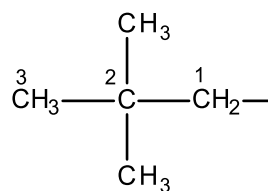
isobutilo



secbutilo



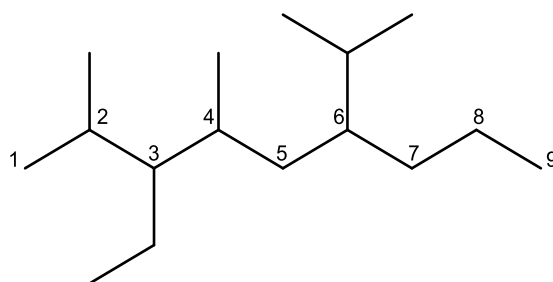
tercbutilo



neopentilo

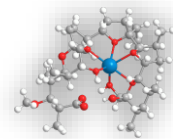
Figura 23. Ejemplos de algunos compuestos especiales simples para grupos alquilo ramificados de acuerdo a la nomenclatura IUPAC.

Los nombres sistemáticos de estos sustituyentes se obtienen numerando la cadena, comenzando por el carbono que se une a la cadena principal. El nombre del sustituyente se forma con el nombre de la cadena más larga terminada en “-ilo”, anteponiendo los nombres de los sustituyentes que tenga dicha cadena secundaria y ordenados alfabéticamente (**Figura 24**).



3-etil-6-isopropil-2,4-dimetilnonano

Figura 24. Ejemplos de hidrocarburos de cadena larga ramificados de acuerdo a clasificación IUPAC.



3.3 Reacciones

Los alcanos muestran una reactividad relativamente baja porque sus enlaces de carbono son relativamente estables y no pueden ser fácilmente fragmentados.

Si bien es cierto que los alcanos, a condiciones moderadas, no reaccionan con la mayoría de agentes comunes, bajo condiciones especiales desarrollan mayor capacidad reactiva, reaccionando al tipo de reactivo y conforme a las condiciones en que se encuentra o se expone al alcano.

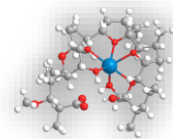
- En fase gaseosa: reaccionan a temperatura y presión alta.
- En fase líquida: son relativamente inertes a temperatura y presión moderada.

3.3.1 Combustión

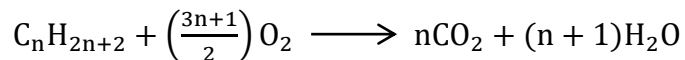
La combustión de los alcanos es una de las reacciones orgánicas más eficientes y mejor conocidas, utilizándose por tanto como combustible o como fuente de calor. La combustión es una reacción de oxidación en la cual todos los átomos de carbono de la molécula se convierten en CO_2 (gas) y los átomos de hidrógeno en H_2O (líquido).

Ambos productos de combustión tienen un contenido energético extremadamente bajo, y por ello su formación conlleva asociado un valor de ΔH° (siendo ΔH° el cambio de entalpía cuando se forma un mol de una sustancia a partir de otra y en condiciones estándar de presión de 1 atm) muy negativo (ΔH° metano = -74.8 kJ/mol; ΔH° etano = -84.7 kJ/mol; ΔH° propano = -103.8 kJ/mol). Siendo en consecuencia una reacción exotérmica, la reacción provoca que se libere energía en forma de calor.

Dependiendo la cantidad de oxígeno (O_2), las reacciones de combustión se denominan completas e incompletas; ésta última ocurre si el suministro de oxígeno no es suficiente y en consecuencia además de agua, se produce monóxido de carbono (CO).



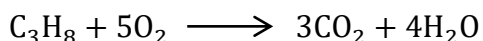
La combustión en un ambiente rico en oxígeno se denomina combustión completa y su ecuación estequiométrica es la siguiente:



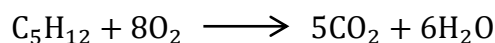
Ejemplos:

A continuación se muestran algunas reacciones de combustión para los alcanos sencillos aplicando la ecuación anterior.

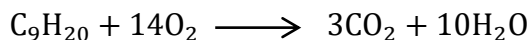
- Propano



- Pentano



- Nonano



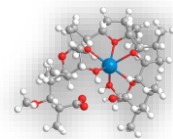
La energía liberada cuando un compuesto se oxida completamente a CO_2 y H_2O se denomina calor de combustión y en muchos casos puede calcularse con gran exactitud.

Los valores para calores de combustión dependen principalmente del número de átomos de carbono e hidrógeno en una molécula.

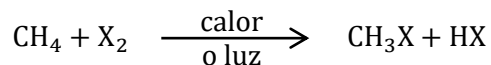
En una serie homóloga, la energía liberada aumenta alrededor de 157.4 kcal/mol por cada metileno ($-\text{CH}_2-$) adicional.

3.3.2 Halogenación

La halogenación es la reacción más común de los alcanos en la que un átomo de hidrógeno se sustituye por un átomo de halógeno para formar un haluro de alquilo (R-X), donde X es un halógeno, principalmente Cl, Br y un haluro de hidrógeno.



Normalmente se necesita calor o luz (fotocatálisis) para iniciar una reacción de halogenación:



Las reacciones de los alcanos con cloro y bromo transcurren a velocidades moderadas y son fáciles de controlar; no obstante, las reacciones con fluor son tan violentas que llegan a ser explosivas y solo podrían realizarse a muy bajas temperaturas. En cambio el yodo, o no reacciona o lo hace lentamente.

Uno de los compuestos halogenados más comunes y de muy amplio uso es el diclorometano (DCM) **Figura 25**, donde dos átomos de cloro substituyen a los correspondientes hidrógenos en la estructura de la molécula de metano:

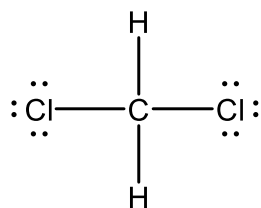
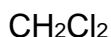
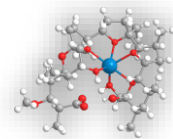


Figura 25. Diclorometano (DCM)

La halogenación de los alcanos es un proceso que cuenta con tres etapas:

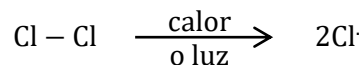
1. Iniciación.- se genera un intermedio reactivo.
2. Propagación.- el átomo de halógeno, reacciona con el alcano, abstrayéndole un átomo de H y formando un radical alquilo.
3. Terminación.- se dan reacciones colaterales que destruyen los intermedios reactivos, y tienden a aminorar o detener la reacción.

Por ejemplo, la halogenación del metano es una reacción que transcurre con la formación de radicales libres y sus etapas se muestran a continuación.



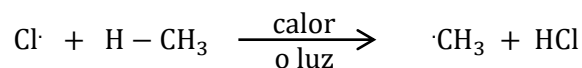
Etapa de iniciación

En el primer paso de la reacción se produce la rotura homolítica del enlace Cl-Cl. Esto se consigue con calor o mediante la absorción de luz.

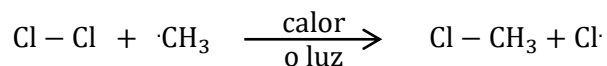


Etapa de propagación

- Etapa 1



- Etapa 2

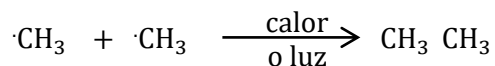


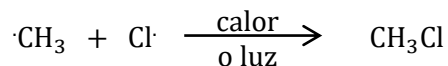
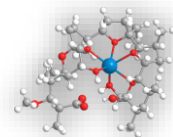
Las etapas 1 y 2 se repiten una y otra vez mientras existan moléculas disponibles de Cl₂ y CH₄, a esto se le conoce como reacción en cadena, la cual es aquella en la que continuamente se consumen y regeneran los intermediarios en una serie de etapas de propagación.

Este mecanismo se conoce como halogenación por radicales libres o reacción en cadena por radicales libres.

Etapa de terminación

Este ciclo de propagación puede romperse por las etapas de terminación, que destruyen los radicales libres formando compuestos estables. La cloración del metano se termina principalmente por la combinación de unos radicales libres con otros.

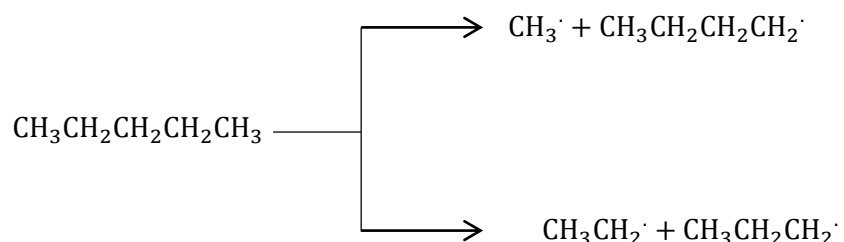




3.3.3 Pirólisis

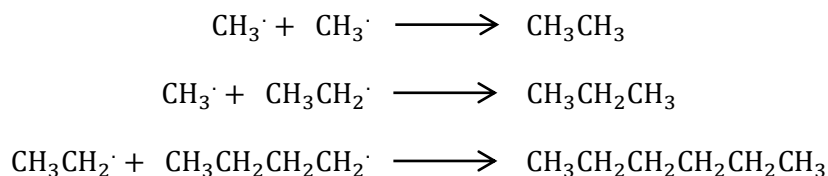
Se llama pirólisis al proceso en el que una molécula se rompe por la acción del calor y normalmente en condiciones controladas. Cuando se pirolizan los alcanos, los enlaces carbono-carbono se rompen fácilmente para producir radicales alquilo más pequeños.

En el caso de los alcanos superiores, la ruptura se produce de forma aleatoria a lo largo de la cadena. Esto se esquematiza con la siguiente molécula de pentano (C_5H_{12}):

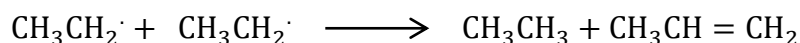


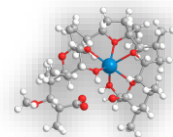
Una vez formado estos radicales se pueden dar al menos alguna de las siguientes reacciones:

- a) Reacción de recombinación.- en esta reacción un radical reacciona con otro radical y genera una molécula más compleja de hidrocarburo.



- b) Reacción de desproporcionamiento.- en este proceso uno de los radicales reactivos transfiere un átomo de hidrógeno al otro radical para producir un alcano y un alqueno.





El resultado neto de la pirólisis es la conversión de un alcano superior en una mezcla de alcanos y alquenos más pequeños.

3.4 Cicloalcanos

Los cicloalcanos son hidrocarburos cíclicos, que forman anillos de átomos de carbono. Son compuestos saturados (alcanos) que, al formar dichos anillos, contienen dos átomos de hidrógeno menos que los alcanos no cíclicos pero con el mismo número de átomos de carbono. Su fórmula molecular es: C_nH_{2n}

3.4.1 Propiedades físicas

Las tendencias en las propiedades físicas en los hidrocarburos cíclicos guardan gran similitud con aquellas de los hidrocarburos de cadena abierta.

Son compuestos poco polares, insolubles en agua, sin embargo sus puntos de fusión y ebullición son superiores a los de cadena abierta debido a que las estructuras cristalinas son más compactas y también las densidades son más altas (**Tabla 7**).

Tabla 7 Propiedades físicas de los cicloalcanos más comunes

Alcano	Punto de ebullición (°C)	Punto de fusión (°C)	Densidad a 20°C (g/ml)
Ciclopropano	-33	-127	0.688
Ciclobutano	13	-80	0.704
Ciclopentano	49	-94	0.746
Ciclohexano	81	6.4	0.788
Cicloheptano	117	-12	0.810
Ciclo-octano	1147	14	0.830

3.4.2 Nomenclatura

Se nombran igual que los alcanos de cadena abierta con el mismo número de átomos de carbono, pero siempre con el prefijo ciclo. Es frecuente representar las moléculas indicando solo su esqueleto, en donde cada vértice corresponde a un átomo de carbono con el número adecuado de hidrógenos (**Figura 26**).

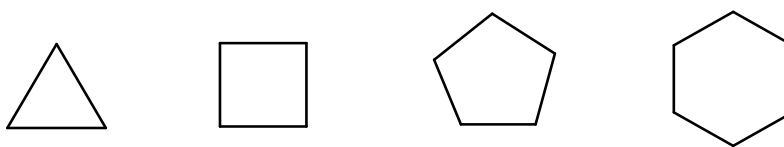
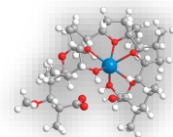


Figura 26. Ejemplos de hidrocarburos cíclicos saturados de acuerdo a clasificación IUPAC.

Las reglas IUPAC para nombrar cicloalcanos son muy similares a las aplicadas en los alcanos.

1. En cicloalcanos con un solo sustituyente, se toma el ciclo como cadena principal de la molécula (**Figura 27**), siendo innecesaria la numeración del ciclo:

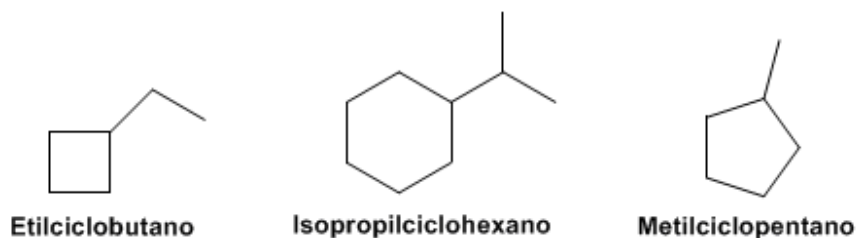


Figura 27. Nomenclatura de cicloalcanos.

Si la cadena lateral es compleja, puede tomarse como cadena principal de la molécula y el ciclo como un sustituyente. Los cicloalcanos como sustituyentes se nombran cambiando la terminación “-ano” por “-ilo”.

2. Si el cicloalcano tiene dos sustituyentes, se nombran por orden alfabético. Se numera el ciclo comenzando por el sustituyente (**Figura 28**) que va antes en el nombre:

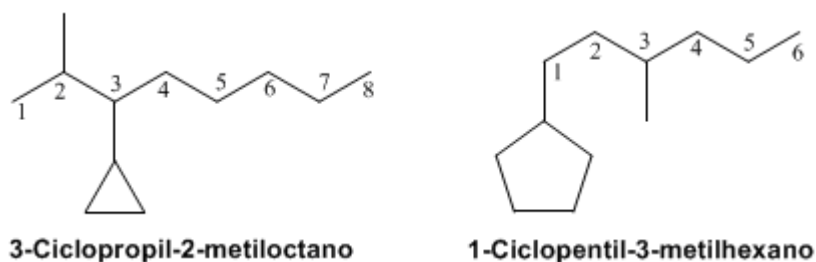
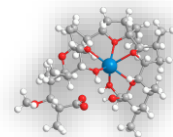


Figura 28. Nomenclatura de cicloalcanos con sustituyentes.



3. Si el anillo tiene tres o más sustituyentes, se nombran por orden alfabético (**Figura 29**). La numeración del ciclo se hace de forma que se otorguen los localizadores más bajos a los sustituyentes:



Figura 29. Nomenclatura de cicloalcanos con tres o más sustituyentes

En caso de obtener los mismos localizadores al numerar comenzando por diferentes posiciones, se tiene en cuenta el orden alfabético.

3.4.3 Isomería cis-trans

Los hidrógenos de un cicloalcano pueden sustituirse por otros átomos o grupos de átomos (-CH₃, -OH, -Cl, etc). Cuando dos hidrógenos en posiciones diferentes del anillo son reemplazados, los sustituyentes pueden adoptar dos orientaciones en el espacio dando lugar a la existencia de los denominados isómeros geométricos *cis* y *trans*.

Si dos sustituyentes se orientan hacia la misma cara tendrán una disposición *cis* y si se orientan hacia caras opuestas, será *trans*. Estos isómeros geométricos no se pueden convertir el uno en el otro sin romper o modificar los enlaces (**Figura 30**).

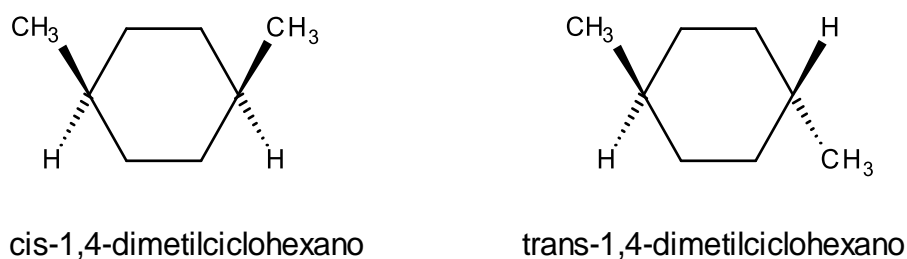
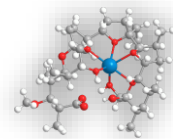


Figura 30. Isomería cis-trans



3.5 Ejercicios

1. ¿Qué tipo de enlace presentan los alcanos?

Sencillo

Doble

Triple

2. ¿Qué estado físico presenta el etano?

Líquido

Sólido

Gas

3. ¿De qué depende el punto de ebullición de los alcanos?

El punto de ebullición de los alcanos es directamente proporcional al peso molecular del compuesto, por lo que, si incrementa el peso molecular, también lo hace el punto de ebullición

4. ¿Cuál de los siguientes radicales es un radical butil-(o)?

$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$

$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$

$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}$

5. ¿Cuál es el prefijo que le corresponde al $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$?

Undec

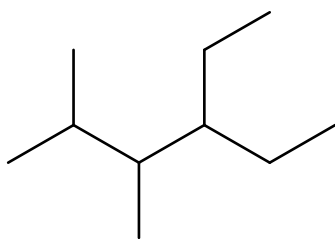
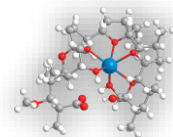
Hept

Dodec

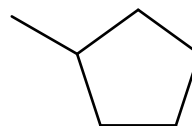
6. ¿A qué se le llama combustión completa?

A una reacción que presenta un ambiente rico en oxígeno.

7. Nombre los siguientes hidrocarburos:

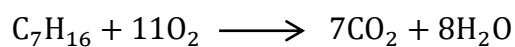


4-etil-2,3-dimetil-hexano



metilciclopentano

8. Escriba la reacción de combustión del butano:



9. Para las reacciones de halogenación ¿En qué etapa se destruyen los radicales libres?

Iniciación

Terminación

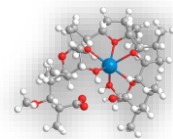
Propagación

10. ¿Qué tipo de reacción forma un alcano y un alqueno?

Pirólisis

Desproporcionamiento

Combustión



4. ALQUENOS

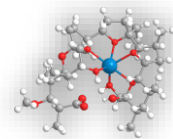
Los alquenos son hidrocarburos que presentan como grupo funcional el doble enlace, el cual influye en la forma de una molécula orgánica y además ocurren en él la mayoría de las reacciones químicas a que son sometidos durante i. e.: etapas de maduración del petróleo.

Los alquenos son incoloros e inoloros y los carbonos unidos por doble enlace presentan hibridación sp^2 ; son abundantes en la naturaleza y muchos tienen importantes funciones biológicas, también son valiosos productos de partida en la obtención de plásticos, fibras sintéticas, materiales de construcción, etc.

4.1 Propiedades físicas

Debido a su doble enlace, las propiedades físicas de los alquenos se modifican ligeramente con respecto a las de los alcanos.

- Estado físico: El estado de agregación de los alquenos depende del número de átomos de carbono presentes en la molécula. A temperatura ambiente los alquenos de C_2H_4 a C_4H_8 son gases, de C_5H_{10} a $C_{15}H_{30}$ son líquidos y de $C_{16}H_{32}$ en adelante son sólidos, fusibles y volátiles sin descomposición (**Tabla 8**).
- Punto de ebullición: Los puntos de ebullición aumentan ligeramente al aumentar el peso molecular (**Figura 31**). Como en los alcanos, la ramificación aumenta la volatilidad y disminuye los puntos de ebullición.
- Punto de fusión: Incrementa a medida que es mayor el número de átomos de carbono (Figura 31).
- Densidad: Son menos densos que el agua y su densidad se encuentra alrededor de 0.7 gr/ml.



- Solubilidad: Como compuestos apolares los alquenos son insolubles en agua pero bastante solubles en disolventes orgánicos apolares como hexano, disolventes halogenados y éteres.
- Conductividad: Son débiles conductores debido a la presencia del enlace π .

Tabla 8. Propiedades físicas de los alquenos.

Alqueno	Punto de ebullición (°C)	Punto de fusión (°C)	Densidad
Eteno	-104.5	-169	--
Propeno	-48	-185.3	--
Buteno	-6.26	-185.3	0.0617
Penteno	30	-165	0.643
Hexeno	63.5	-140	0.675
Hepteno	94	-120	0.698
Octeno	121	-101.7	0.716

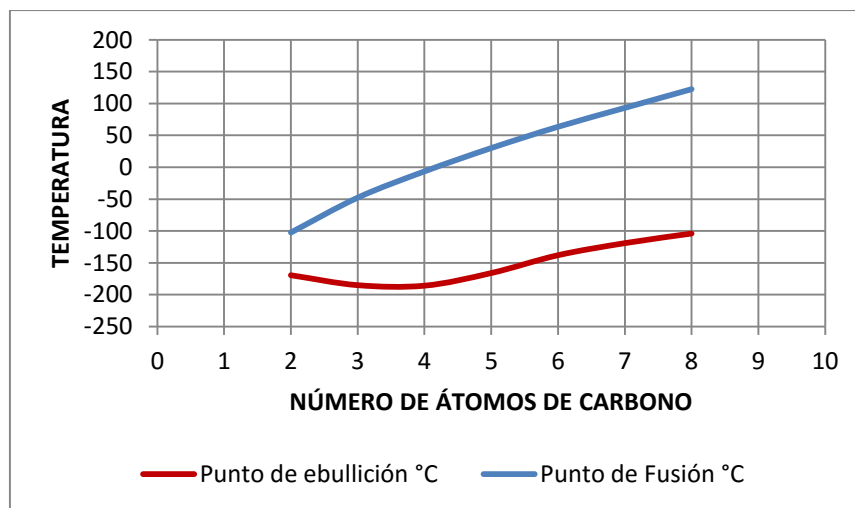
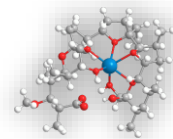


Figura 31. Comportamiento de los puntos de ebullición y de fusión de los primeros componentes de la familia de los alquenos.

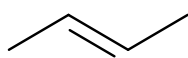
4.2 Nomenclatura

Los alquenos se nombran de acuerdo a la convención de la nomenclatura IUPAC, reemplazando la terminación “ano” del compuesto equivalente saturado (alcano) por la terminación “eno”.

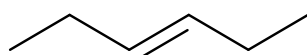


4.2.1 Alquenos lineales

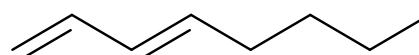
Debido a su doble enlace, los alquenos utilizan localizadores de cadena en el nombre para indicar la posición del mismo cuando hay más de un doble enlace en el compuesto, así como prefijos multiplicativos (di-, tri-, tetra-, etc.). La cadena se enumera con la finalidad de darle al o a los dobles enlaces el localizador más bajo (**Figura 32**):



2-buteno



3-hexeno



1,3-octadieno

Figura 32. Ejemplos de alquenos lineales

4.2.2 Alquenos ramificados

Las reglas a seguir para nombrar los alquenos de cadena ramificada son:

1. **Elegir la cadena principal:** Se escoge la cadena que contenga el mayor número de dobles enlaces sin importar que no sea la más larga. Por ejemplo, en la **Figura 33** los tres dobles enlaces se encuentran dentro de la cadena principal, por lo que se considera como la cadena más extensa:

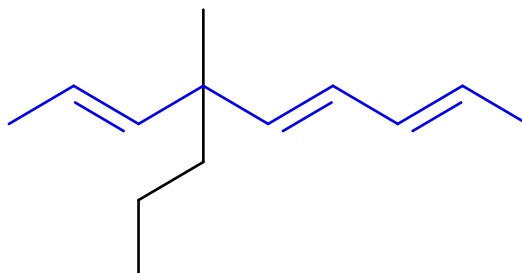
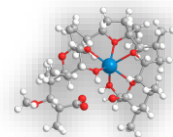


Figura 33. Cadena principal.

2. **Numerar la cadena principal:** A cada átomo de carbono de la cadena principal se le asigna un número (localizador), empezando la numeración por el extremo más cercano al doble enlace, de forma que las ramificaciones también queden en los números más bajos. En el caso de tener varias posibilidades se elige la



opción en la que los nombres de los radicales ordenados alfabéticamente tengan el menor localizador. En el ejemplo considerado (**Figura 34**) se enumera de izquierda a derecha, de modo que las ramificaciones se encuentren en el localizador más bajo:

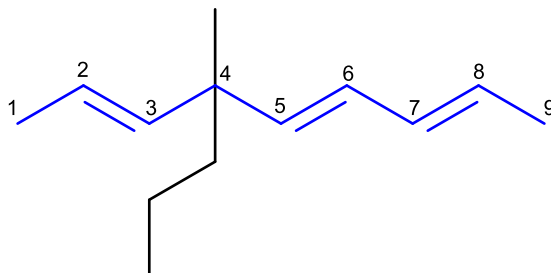
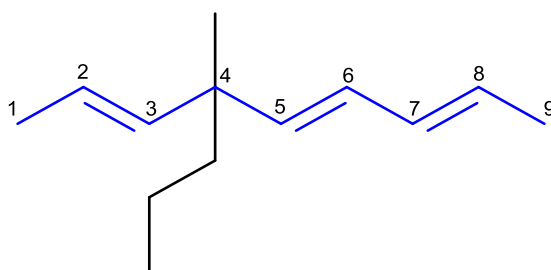


Figura 34. Numeración de la cadena principal

- 3. Nombrar el compuesto:** Se nombra cada radical por orden alfabético y se separan con guiones. Si existe más de un radical con el mismo nombre, se añade el prefijo que indica el número de veces que se repite, posteriormente se agregan el o los localizadores en donde se encuentren los dobles enlaces, y se finaliza con el nombre de la cadena principal con el prefijo multiplicativo correspondiente en caso de más de un doble enlace (**Figura 35**).

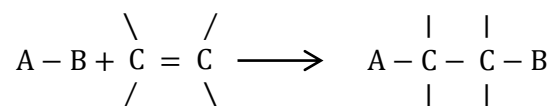
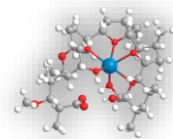


4-metil-4-propil-2,5,7-nonatrieno

Figura 35. Nombre de alqueno ramificado

4.3 Reacciones

A diferencia de los alcanos, los alquenos reaccionan con una gran cantidad de reactivos, siendo su reacción característica la adición al enlace doble y cuya ecuación general es:

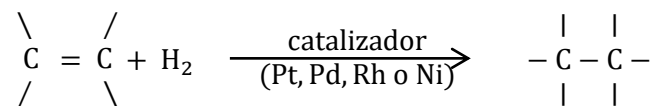


Los alquenos son hidrocarburos insaturados porque tienen la capacidad de reaccionar con sustancias que se adicionan a ellos, y es por ello que la cantidad de compuestos representados como $A - B$ en esta ecuación es bastante amplia, ofreciendo abundantes posibilidades para convertir a los alquenos en un gran número de otros tipos estructurales.

4.3.1 Hidrogenación de alquenos

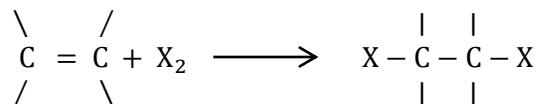
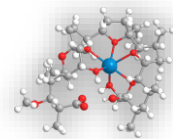
En reacciones de adición la hidrogenación de alquenos se producen alcanos; esta reacción consiste en la adición de H_2 a un enlace múltiple y es considerada genéricamente como una reducción ya que el doble enlace representa un estado de oxidación más alto que un enlace carbono-carbono saturado.

La adición no catalizada de hidrógeno a un alqueno, aunque exotérmica, es muy lenta, sin embargo, la velocidad de hidrogenación aumenta en forma considerable en presencia de ciertos catalizadores metálicos finamente divididos, tales como Pt, Pd, Rh o Ni:

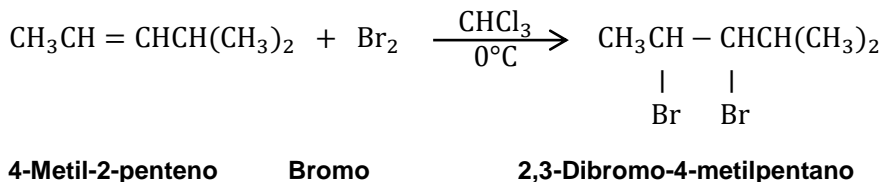


4.3.2 Adición de Halógenos a alquenos

Los halógenos por lo normal reaccionan con alquenos por adición electrofílica. Los productos de estas reacciones se llaman dihalogenuros vecinales. Dos sustituyentes, en este caso los halógenos, son vecinales si están unidos a carbonos adyacentes:

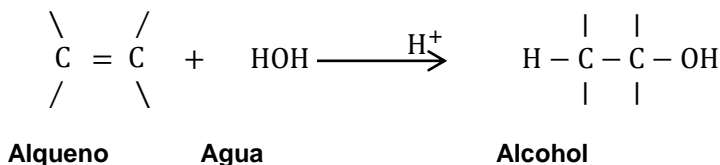


El halógeno puede ser cloro (Cl₂) o bromo (Br₂), y la adición tiene lugar con rapidez a temperatura ambiente y por debajo de ella, en una variedad de disolventes:

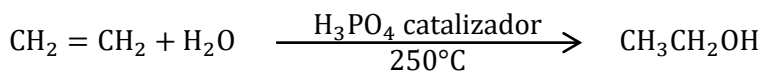


4.3.3 Hidratación de alquenos catalizada por ácidos

Se añade agua a los alquenos para producir alcoholes en un proceso llamado hidratación. La reacción tiene lugar al tratar el alqueno con agua y un catalizador de ácido fuerte:

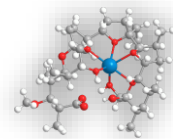


Por ejemplo, la hidratación del etileno procede a 250°C usando ácido fosfórico como catalizador:



4.3.4 Oxidación de Alquenos

Los alquenos pueden oxidarse, dando lugar a una variedad de productos dependiendo del reactivo usado. Las reacciones que implican oxidación de un doble enlace (-C=C-) pueden clasificarse en dos grupos generales:



1. Oxidación del enlace π sin rompimiento del enlace σ .- cuyos productos pueden ser 1,2-dioles o epóxidos.
2. Oxidación del enlace π con rompimientos del enlace σ .- en donde los productos son cetonas, aldehídos o ácidos carboxílicos.

4.3.5 Polimerización

Los polímeros son moléculas de gran tamaño, constituidos estructuralmente por moléculas más pequeñas o subunidades que se repiten y que se denominan monómeros.

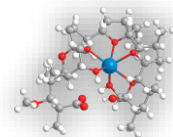
Para obtener un polímero de adición se requiere un catalizador. Las reacciones pueden ser catalizadas por un iniciador para formación de radicales o polimerización vía radicales libres: por un ácido o polimerización catiónica; y por una base en polimerización aniónica.

- *Polimerización por Radicales Libres:* Ocurre cuando un alqueno se calienta en presencia de iniciadores por radicales.
- *Polimerización Catiónica:* Los alquenos también polimerizan cuando se los somete a la acción de ácidos fuertes. Éstos pueden ser ácidos Brónsted o de Lewis. Las cadenas que se forman bajo este mecanismo son cationes y no radicales.

4.4 Cicloalquenos

Los cicloalquenos son hidrocarburos cíclicos que tienen un doble enlace en el ciclo. Su fórmula general es: C_nH_{2n-2}

Cuando el ciclo tiene 2 o más enlaces dobles, se les llama ciclopoliaquenos.



4.4.1 Propiedades físicas

- Puntos de ebullición.- Sus puntos de ebullición aumentan al aumentar el número de átomos de carbono.
- Puntos de fusión.- Las temperaturas de fusión son inferiores a las de los cicloalcanos correspondientes (de mismo número de carbonos) puesto que, la rigidez del doble enlace impide un empaquetamiento compacto.
- Solubilidad.- Son insolubles en agua, pero solubles en disolventes no polares.
- Densidad.- Son menos densos que el agua (**Tabla 9**).

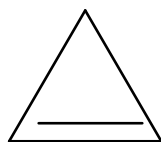
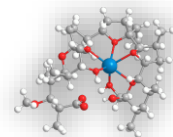
Tabla 9 Propiedades físicas de los cicloalquenos

Alqueno	Punto de ebullición (°C)	Punto de fusión (°C)	Densidad a 20°C (g/ml)
Ciclopenteno	44	-135	0.772
1,3-ciclopentadieno	40	-97	0.802
Ciclohexeno	83	-104	0.810
1,3-ciclohexadieno	80	--	0.841

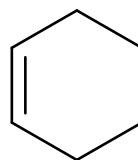
4.4.2 Nomenclatura

Para nombrar a los cicloalquenos se siguen las siguientes reglas:

1. Se nombra igual que un alqueno, con el mismo número de átomos de carbono, anteponiéndole la palabra ciclo. En ausencia de sustituyentes, no son necesarios localizadores; se entiende que el enlace doble conecta C-1 y C-2. Dos ejemplos simples son (**Figura 36**):



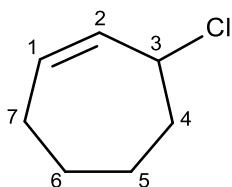
ciclopropeno



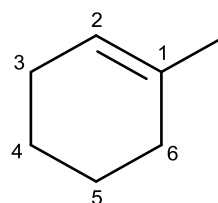
ciclohexeno

Figura 36. Ejemplos de cicloalquenos

2. Si se tienen cicloalquenos sustituidos, se numeran comenzando con el enlace doble, procediendo a través de él y continuando la secuencia alrededor del anillo (**Figura 37**). La dirección se elige a modo de dar el localizador más bajo al o los sustituyentes, por ejemplo:



3-clorociclohepteno



1-metilciclohexeno

Figura 37. Cicloalquenos con sustituyentes

4.5 Ejercicios

1. ¿Qué son los alquenos?

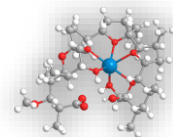
Son hidrocarburos insaturados, con hibridación sp^2 que presentan como grupo funcional un enlace doble.

2. ¿Qué estado físico presenta el propeno?

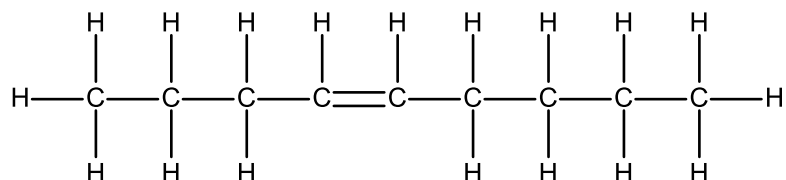
Líquido

Sólido

Gas



3. Escriba la fórmula desarrollada del 4-noneno.



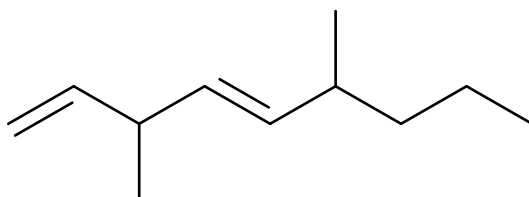
4. ¿Cómo se nombra un alqueno lineal?

Se utiliza la terminación “eno” anteponiendo un localizador que indica en donde se encuentra el doble enlace. En caso de haber varios enlaces se utilizan prefijos multiplicativos.

5. Dibuje el alqueno con fórmula $\text{C}_{10}\text{H}_{20}$



6. Represente el siguiente hidrocarburo: 3,6-dimetil-1,4-nonadieno

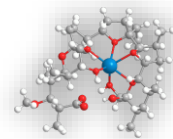


7. ¿Cuál es la reacción característica de los alquenos?

Pirólisis

Adición

Hidrogenación



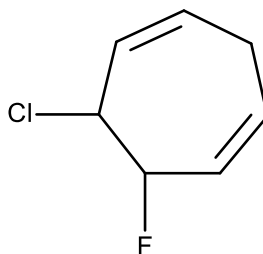
8. ¿Qué es un polímero?

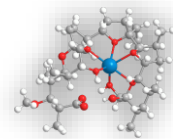
Macromolécula formada por la unión de monómeros.

9. ¿Cuáles son los catalizadores que se utilizan en la hidrogenación de alquenos?

Platino, Paladio, Rodio y Níquel.

10. Dibuje el hidrocarburo siguiente: 6-cloro-7-fluor-1,4-cicloheptadieno.





5. ALQUINOS

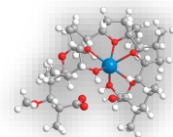
Se llaman alquinos a los hidrocarburos que se caracterizan por presentar un triple enlace carbono – carbono ($C \equiv C$). Los compuestos que tienen su enlace triple al final de la *cadena de carbono* se llaman *alquinos monosustituídos o terminales*, y los *alquinos con enlaces triples internos* reciben el nombre de *disustituídos*.

Los alquinos presentan hibridación sp y su triple enlace es un grupo funcional que interactúa con muchos de los reactivos que reaccionan con el doble enlace de los alquenos. Los alquinos son inusuales en la naturaleza, sin embargo ciertas plantas los producen como agentes de protección contra depredadores.

5.1 Propiedades físicas

Las propiedades físicas de los alquinos son similares a la de los alcanos y alquenos, sin embargo los alquinos son más polares debido a que un carbono sp ejerce mayor atracción sobre los electrones, comparado con un carbono sp^3 o sp^2 .

- Estado físico: A temperatura y presión ambiente los alquinos de C_2H_2 a C_4H_6 son gases, en el rango de C_5H_8 a C_7H_{12} son líquidos y de C_8H_{14} en adelante son sólidos **(Tabla 10)**.
- Punto de ebullición: Los puntos de ebullición muestran el aumento usual con el incremento del número de carbonos en la molécula y el efecto habitual de ramificación de las cadenas **(Figura 38)**.
- Punto de fusión: A medida que aumenta el peso molecular, aumenta también el punto de fusión (Figura 38).
- Densidad: Incrementa conforme aumenta el número de carbonos y son menos densos que el agua.



- Solubilidad: Son insolubles en agua, pero bastante solubles en disolventes orgánicos usuales y de baja polaridad, tales como: éter, benceno, tetracloruro de carbono, etc.

Tabla 10. Propiedades físicas de los alquinos

Alquino	Punto de ebullición (°C)	Punto de fusión (°C)	Densidad
Etino	-75	-82	0.695
Propino	-23	-101.5	--
1-Butino	9	-122	--
1-Pentino	40	-98	0.695
1-Hexino	72	-124	0.719
1-Heptino	100	-80	0.733
1-Octino	126	-70	0.747
1-Nonino	151	-65	0.763
1-Decino	182	-36	0.770

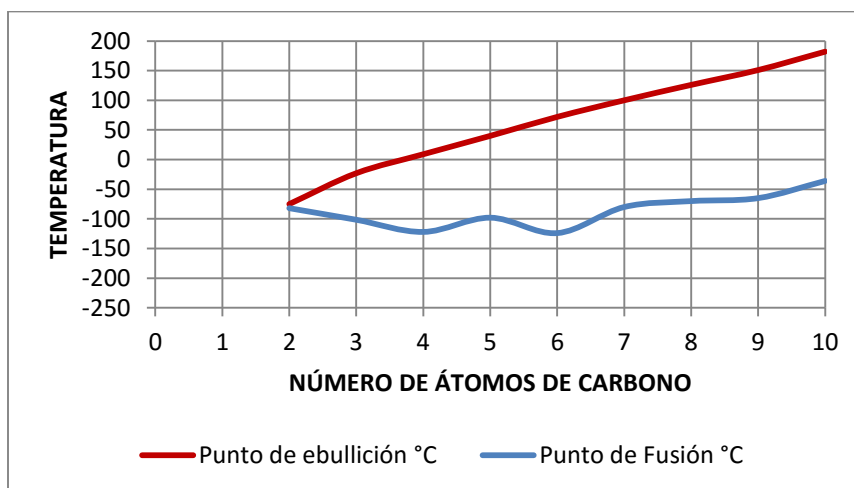
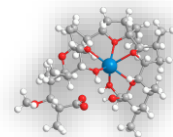


Figura 38. Comportamiento de los puntos de ebullición y de fusión de los primeros componentes de los alquinos.

5.2 Nomenclatura

Las reglas de nomenclatura de la IUPAC para nombrar a los alquinos son las mismas que utilizamos en los alquenos, a diferencia de que en los alquinos la terminación es “ino”.



5.2.1 Alquinos lineales

1. **Enumerar la cadena principal:** Se enumera la cadena principal del alquino iniciando por el extremo más cercano al triple enlace (**Figura 39**):

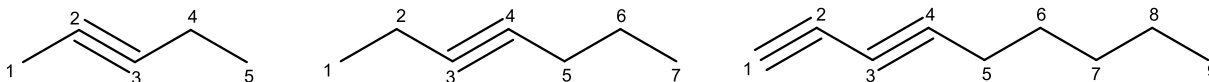


Figura 40. Enumerar la cadena.

2. **Nombrar el compuesto:** Se inicia poniendo el o los localizadores en donde se encuentren los triples enlaces, y se finaliza con el nombre de la cadena principal y de ser el caso, se agrega el prefijo multiplicativo correspondiente (**Figura 40**). Para los ejemplos anteriores quedaría:

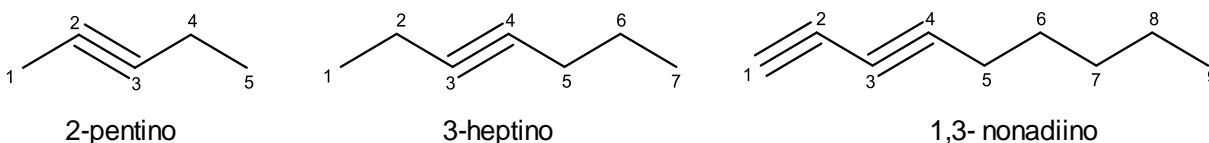


Figura 40. Nomenclatura de alquinos lineales

5.2.2 Alquinos ramificados

Los alquinos ramificados se nombran siguiendo las siguientes reglas:

1. **Elegir la cadena principal:** Se elige como cadena principal aquella que contenga el mayor número de triples enlaces (**Figura 41**):

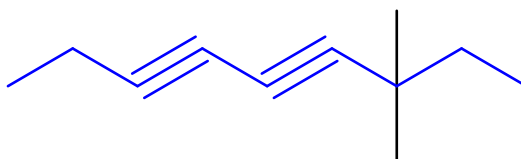
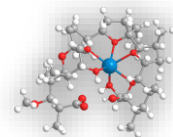


Figura 41. Cadena principal.

2. **Numerar la cadena principal:** Se asignan localizadores a la cadena principal empezando por el extremo más cercano al triple enlace, y en el caso de tener



varias posibilidades, se elige la opción en la que los nombres de los radicales ordenados alfabéticamente tengan el menor localizado (**Figura 42**):

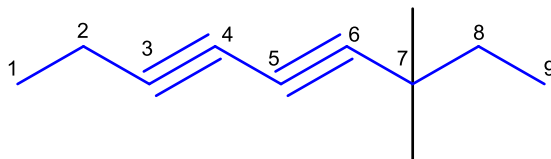
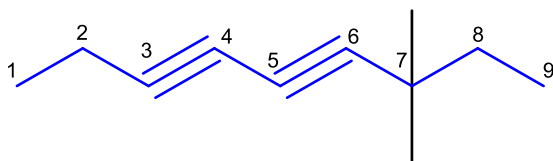


Figura 42. Numerar cadena principal.

- 3. Nombrar el compuesto:** Se nombra cada radical por orden alfabético separados con guiones, y en caso de existir más de un radical con el mismo nombre se añade el prefijo que indica el número de veces que se repite, posteriormente se agrega el o los localizadores en donde se encuentren los triples enlaces, y se finaliza con el nombre de la cadena principal con el prefijo multiplicativo correspondiente si se tiene más de un triple enlace (**Figura 43**). Para el ejemplo ilustrado:

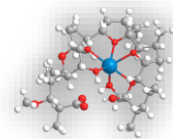


7-dimetil-3-5-nonadiino

Figura 43. Nombre del alquino ramificado

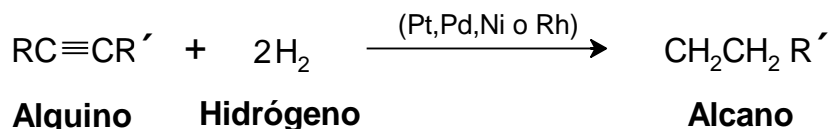
5.3 Reacciones

A pesar de la similitud en la estructura electrónica de alquenos y alquinos, el triple enlace de los alquinos es menos reactivo que el doble enlace de los alquenos, pero presentan las mismas reacciones por adición que éstos. Entre las principales reacciones que presentan los alquinos se encuentran las siguientes:

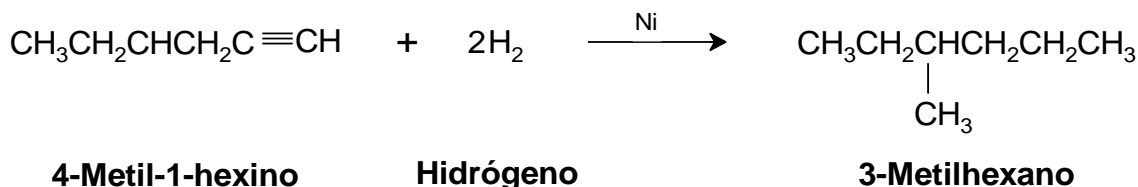


5.3.1 Hidrogenación catalítica

Las condiciones para la hidrogenación de alquinos son similares a las empleadas para alquenos. En presencia de platino, paladio, níquel o rodio finamente triturado, se agregan dos equivalentes molares de hidrógeno al enlace triple de un alquino para formar un alcano.

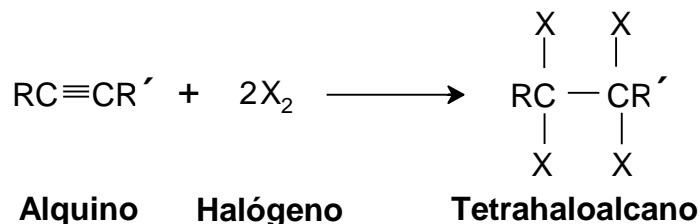


Ejemplo:

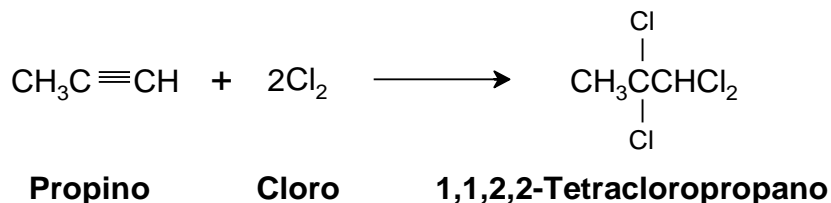


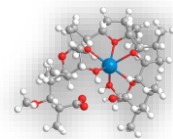
5.3.2 Adición de Halógenos

Los alquinos reaccionan con cloro y bromo para formar tetrahaloalcanos. En estas reacciones dos moléculas del halógeno se adicionan al triple enlace:



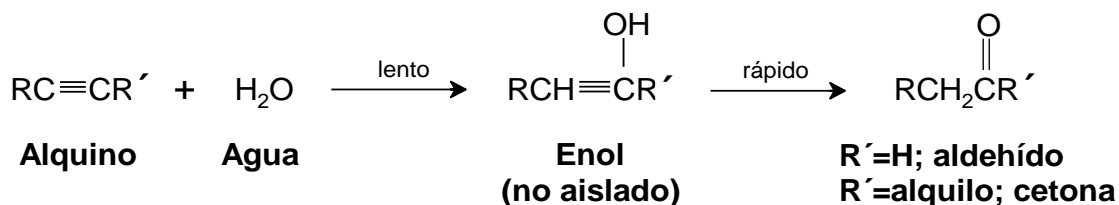
Ejemplo:





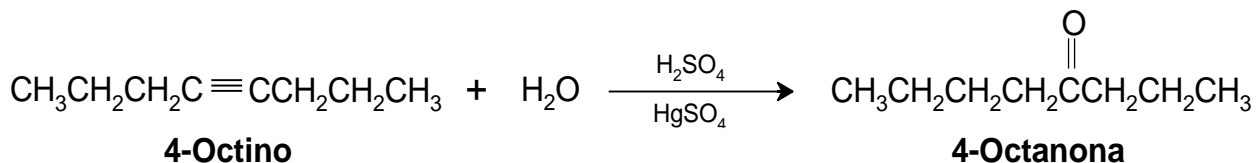
5.3.3 Hidratación de alquinos

En la hidratación de alquinos el producto intermediario que se forma es el alcohol vinílico o enol, el cual se re-arregla al instante y genera una cetona por un proceso llamado tautomería ceto-enol. El grupo -OH se añade al carbono más sustituido y el -H se fija al menos sustituido:



Los alquinos no reaccionan en forma directa con el agua, pero se hidratan con facilidad en presencia de un catalizador, ya sea ácido sulfúrico, sulfato de mercurio (II) u óxido de mercurio (II).

Ejemplo:

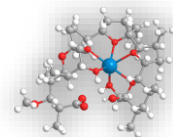


5.4 Cicloalquinos

Los cicloalquinos son hidrocarburos alicíclicos con enlaces triples entre carbonos y muy poco frecuentes en la naturaleza. Los alquinos cíclicos son muy inestables y por lo tanto muy raros y esto se debe a la presencia del triple enlace. Su fórmula general es $\text{C}_n\text{H}_{2n-2}$

5.4.1 Propiedades físicas

- Punto de ebullición.- los puntos de ebullición de los cicloalquinos incrementan al aumentar el número de carbonos de las moléculas.

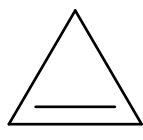


- Puntos de fusión.- aumentan de acuerdo al número de carbonos.
- Solubilidad.- son solubles en disolventes no polares e insolubles en agua.
- Densidad.- son menos densos que el agua.

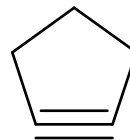
5.4.2 Nomenclatura

Para nombrar a los cicloalquinos se siguen las mismas reglas de nomenclatura IUPAC que se aplican a los cicloalquenos:

1. Se nombra igual que un alquino con el mismo número de átomos de carbono, anteponiéndole la palabra ciclo (**Figura 44**). En ausencia de sustituyentes, no son necesarios localizadores:



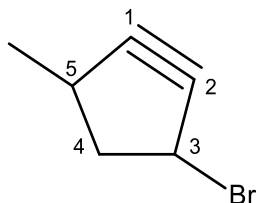
ciclopropino



ciclopentino

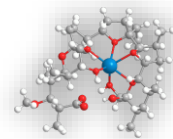
Figura 44. Cicloalquinos

2. En caso de tener sustituyentes, los cicloalquinos se numeran comenzando con el triple enlace y continuando la secuencia alrededor del anillo a modo de que el o los sustituyentes tengan los números más bajos:



3-bromo-5-metil-ciclopentino

Figura 45. Cicloalquino con sustituyentes



5.5 Ejercicios

1. ¿Cómo se llaman los hidrocarburos con enlaces triples internos?

Disustituidos

Monosustituidos

Alquenos

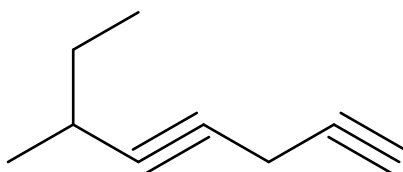
2. ¿Cuál es el Peso Molecular del $C_{30}H_{58}$?

280

418

370

3. ¿Cuántos carbonos tiene la cadena principal del siguiente hidrocarburo?

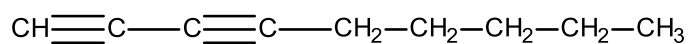


7

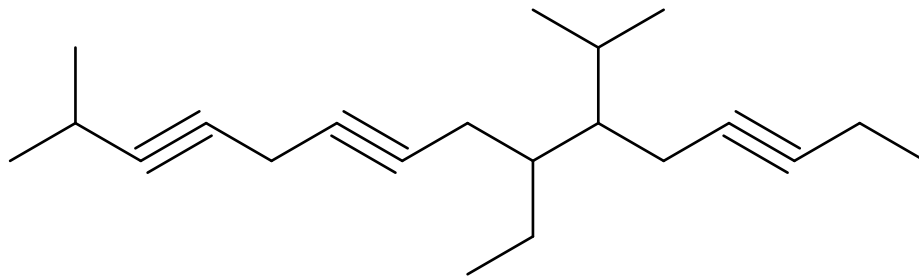
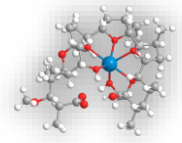
6

8

4. Dibuje la fórmula semidesarrollada del 1,3-nonadiino.



5. Nombre el siguiente hidrocarburo:



9-etil-10-isopropil-2-metil-3,6,12-pentadecatrieno

6. ¿Cuál es el producto en una reacción de hidratación catalítica?

Alqueno

Alcano

Alquino

7. ¿Cuál es el producto final de la hidratación de alquinos?

Agua

Alcohol

Cetona

8. ¿Cómo se llama la reacción en la que interviene Bromo o Cloro?

Adición

Hidratación

Hidrogenación

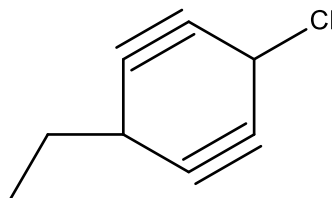
9. ¿Cuál es el producto intermedio en la hidratación de alquinos?

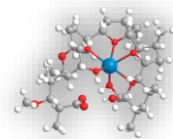
Alcohol

Alcano

Agua

10. Dibuje la estructura del 3-cloro-6-etil-1,4-ciclohexadieno.





6. HIDROCARBUROS AROMÁTICOS

Conocidos también como “arenos”, los hidrocarburos aromáticos son hidrocarburos cíclicos basados en el anillo de benceno como unidad estructural. Los ejemplos más comunes y más simples en la naturaleza, sintetizados y en el petróleo son (**Figura 46**):

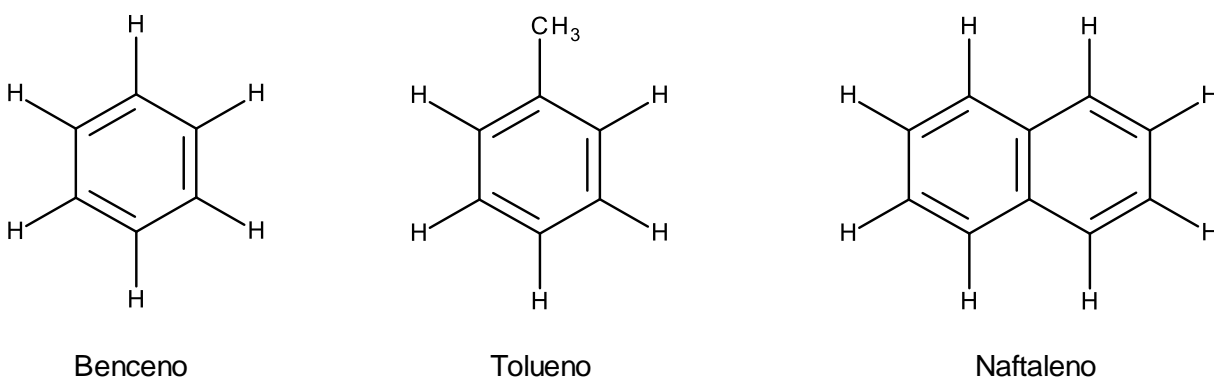
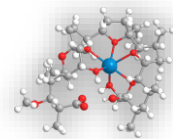


Figura 46. Hidrocarburos aromáticos más comunes.

Las características más determinantes para considerar a un compuesto como aromático son: la presencia de un anillo que contiene dobles enlaces y, una energía de resonancia excepcionalmente grande.

Los hidrocarburos aromáticos se denominan como tales dado que presentan aromas agradables, pero independientemente de su olor, el término aromático se utiliza para designar a compuestos que tienen una estabilidad similar; y es por ello, que el benceno y sus derivados dan lugar a la serie aromática; la cual se construye de las siguientes maneras:

1. Sustitución de los átomos de hidrógeno del núcleo bencénico por otros elementos.
2. Unión de dos o más anillos de benceno, ya sea directamente o mediante cadenas alifáticas u otros radicales intermedios.
3. Condensación de los anillos de benceno.



6.1 Hidrocarburos aromáticos monocíclicos

Son moléculas formadas por un solo anillo aromático; y de acuerdo a la sustitución de hidrógenos en el en el anillo bencénico, se clasifican en:

- Monosustituídos.- Resultan de la sustitución de un hidrógeno del anillo bencénico **(Figura 47)**:

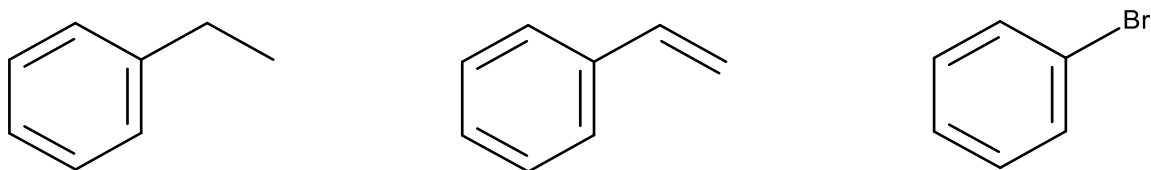


Figura 47. Hidrocarburos Monosustituídos.

- Disustituídos.- El anillo bencénico tiene dos hidrógenos sustituidos **Figura 48)**:

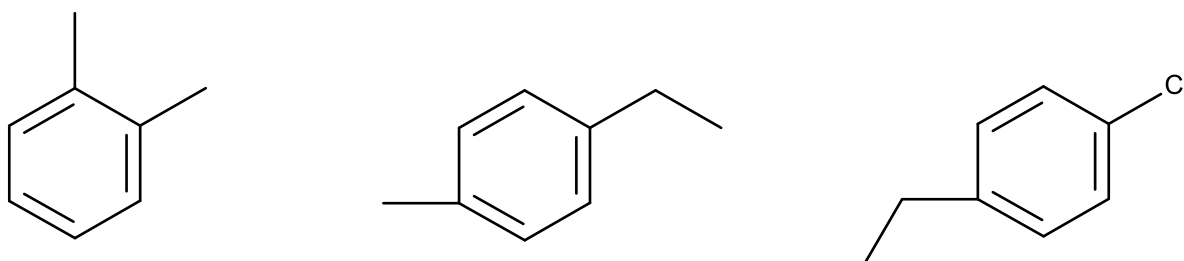


Figura 48. Hidrocarburos Disustituídos.

- Polisustituídos.- Se tienen más de dos sustituyentes en el anillo bencénico **(Figura 49)**:

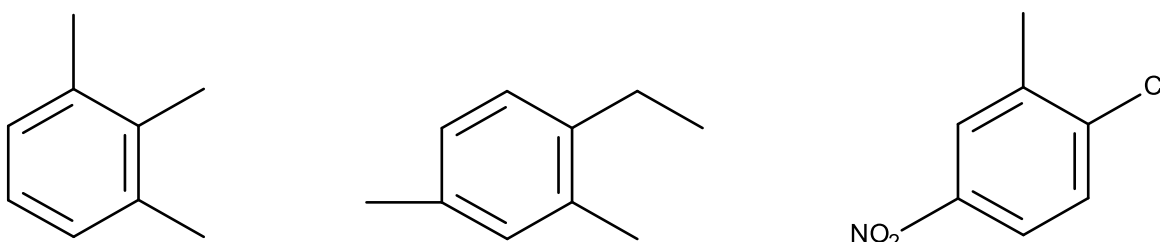
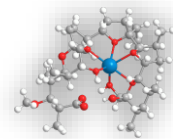
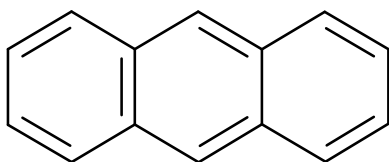


Figura 49. Hidrocarburos Polisustituídos.

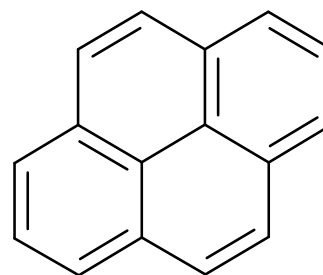


6.2 Hidrocarburos aromáticos Policíclicos

Son hidrocarburos formados por la unión de varios anillos bencénicos y se les conoce también como polinucleares o poliaromáticos (PAH), por sus siglas en inglés), siendo el más simple el naftaleno. Existen gran cantidad de hidrocarburos policíclicos aromáticos, algunos son productos de la combustión, algunos están presentes en mantos de carbón y otros se han sintetizado en el laboratorio. La determinación de estos compuestos es de gran importancia debido a que muchos de ellos han sido reportados como cancerígenos o mutagénicos. Dos de los PAH's más comunes (aunque en muy baja concentración en petróleos) son (**Figura 50**):



Antraceno

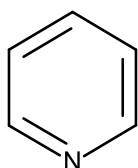


Pireno

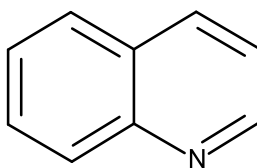
Figura 50. Hidrocarburos aromáticos Policíclicos

6.3 Hidrocarburos aromáticos Heterocíclicos

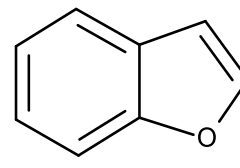
Los compuestos aromáticos heterocíclicos, son aquellos que están formados por anillos que contienen átomos de otros elementos con hibridación sp^2 . Los elementos más comunes en PAH's son: nitrógeno, oxígeno y azufre. Los PAH's heterocíclicos más comunes en petróleos o carbón son (**Figura 51**):



Piridina

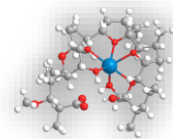


Quinolina



Benzofurano

Figura 51. Hidrocarburos heterocíclicos



Estas estructuras pueden ser monocíclicas o policíclicas. Tienen importancia fisiológica y química, ya que muchos de ellos constituyen una fuente de materia prima para la industria farmacéutica.

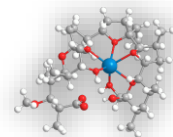
6.4 Propiedades físicas

- Puntos de ebullición: Los puntos de ebullición de muchos derivados del benceno dependen de sus momentos dipolares
- Puntos de fusión: Los puntos de fusión de los hidrocarburos aromáticos son mayores que los de los correspondientes alifáticos debido a la estructura del benceno. Sus moléculas presentan un carácter plano y tienden a ser más simétricos, por lo que se empaquetan mejor en las estructuras cristalinas haciendo que sus puntos de fusión sean más elevados.
- Solubilidad: En general, los hidrocarburos aromáticos son insolubles en agua, excepto aquellos que contienen grupos funcionales muy polares, tales como el fenol y el ácido benzoico, que son moderadamente solubles.
- Densidad: Los hidrocarburos aromáticos son ligeramente más densos que sus análogos no aromáticos, pero una buena cantidad, aunque no todos son más densos que el agua.

6.5 Nomenclatura

Todos los compuestos que contienen un anillo de benceno son aromáticos, y para nombrarlos se utiliza la terminación benceno y se siguen las siguientes reglas:

- Monosustituídos.- Se nombra el sustituyente antes de la palabra benceno.
- Disustituídos.- Se indica la posición de los sustituyentes de acuerdo a la separación que hay entre ellos mediante los siguientes prefijos (**Figura 52**):



- ✓ **Meta (m-):** cuando existe un lugar de separación relativo entre un sustituyente y otro, por ejemplo en los lugares 1 y 3.
- ✓ **Para (p-):** cuando los sustituyentes tienen la misma distancia de separación entre sí o son diametralmente opuestos, se encuentran en los lugares 1 y 4, respectivamente.
- ✓ **Orto (o-):** Los sustituyentes se encuentran en posiciones continuas, es decir, en los lugares 1 y 2.

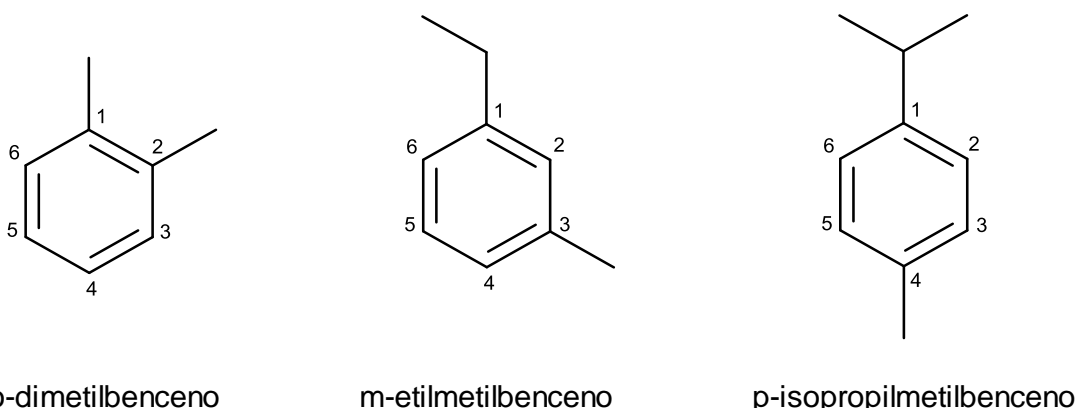


Figura 52. Hidrocarburos disustituidos

- **Polisustituidos.-** La posición de los sustituyentes se indica mediante localizadores, de modo que tengan los números más bajos; a su vez, la aparición de los sustituyentes es en orden alfabético:

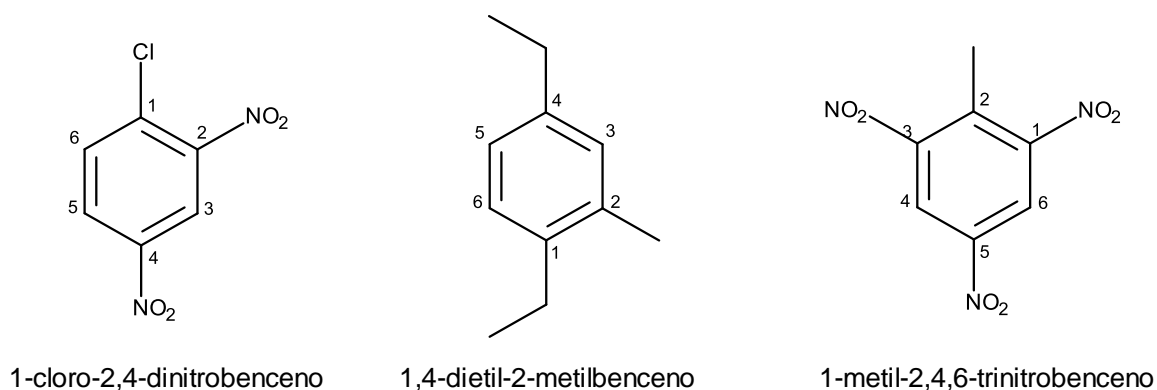
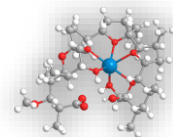


Figura 53. Hidrocarburos Polisustituidos

Si el anillo de benceno es un sustituyente, se utiliza la palabra "fenil".



En caso de que dos anillos de benceno estén unidos por un enlace sencillo, el nombre que asigna la IUPAC es “bifenil” (**Figura 54**). Por ejemplo:



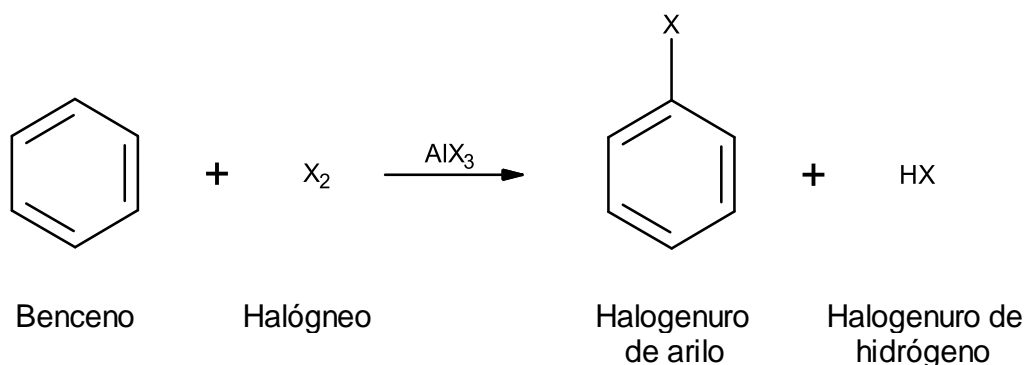
Figura 54. Hidrocarburos Aromáticos con sustituyentes

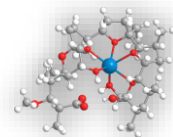
6.6 Reacciones

Los hidrocarburos aromáticos son mucho más estables y menos reactivos que otros compuestos insaturados, y cuando tiene lugar una reacción, se observa sustitución en lugar de adición. Los reactivos que reaccionan con el anillo aromático del benceno y sus derivados son electrófilos, por lo que, el anillo bencénico experimenta sustitución electrofílica aromática, en donde dependiendo del electrófilo que se incorpora al anillo se tienen las siguientes reacciones:

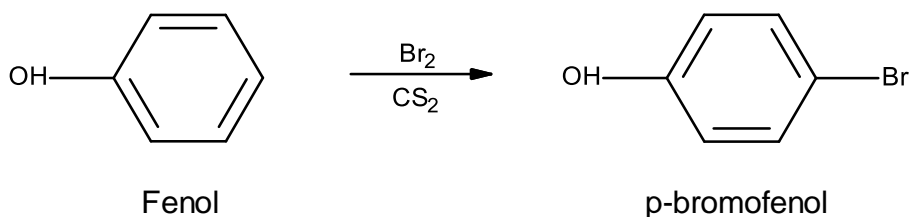
6.6.1 Halogenación

La cloración y bromación de los arenos se lleva a cabo presencia de un ácido que actúa como catalizador, con la excepción de aquellos aromáticos que son muy reactivos y que experimentan halogenación en ausencia de dicho catalizador:



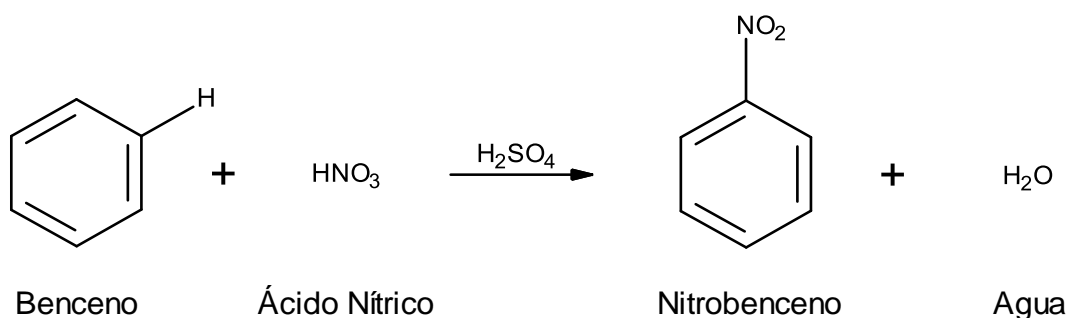


Ejemplo:

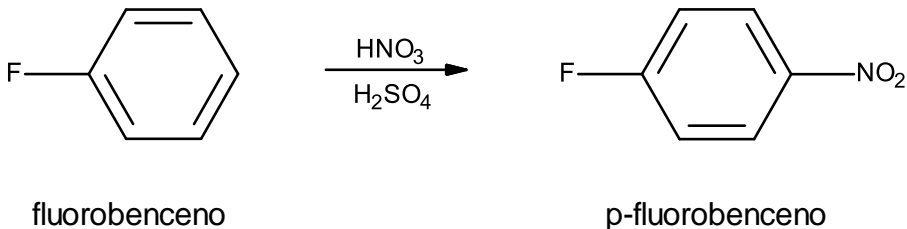


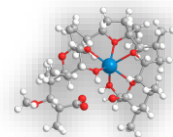
6.6.2. Nitración

Los arenos que son muy reactivos y tienen sustituyentes fuertemente activadores, experimentan nitración en ácido nítrico solo, siendo el electrófilo activo el catión nitronio:



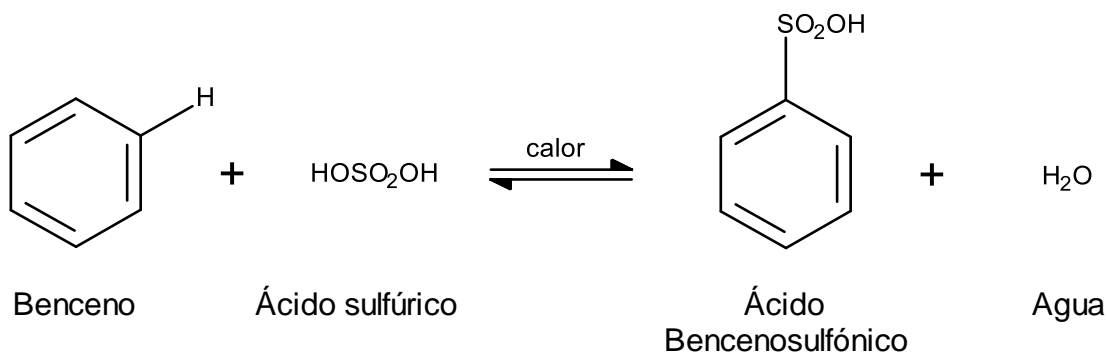
Ejemplo:



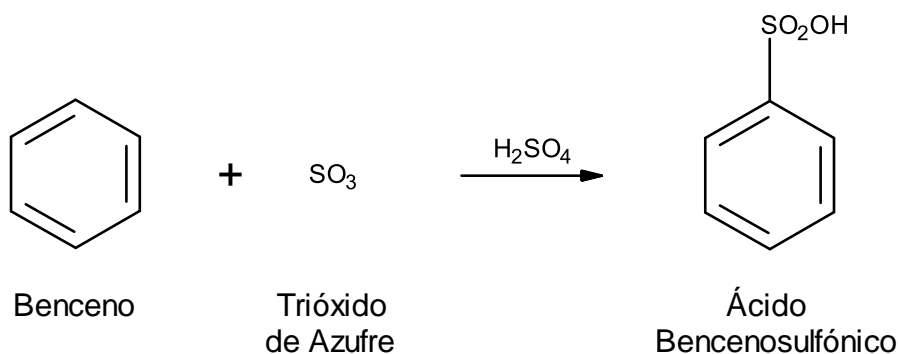


6.6.3. Sulfonación

La reacción del benceno con ácido sulfúrico concentrado forma ácido bencenosulfónico. Es una reacción reversible en donde un grupo de ácido sulfónico reemplaza a uno de los hidrógenos del anillo:



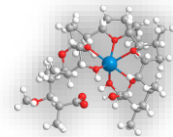
Ejemplo:



6.7 Ejercicios

1. ¿Qué caracteriza a los hidrocarburos aromáticos?

La presencia de al menos un anillo con 3 dobles enlaces; dicho anillo recibe el nombre de “benceno”.



2. ¿Qué nombre reciben los hidrocarburos aromáticos con más de dos sustituyentes?

- Polisustituídos Disustituídos Policíclicos

3. ¿Cómo se llaman los hidrocarburos con más de un anillo bencénico y que no presentan sustituyentes?

- Heterocíclicos Polinucleares Monosustituídos

4. ¿Qué prefijo se utiliza si se tienen sustituyentes en posiciones continuas del anillo?

- Meta Iso Orto

5. ¿Qué reacción llevan a cabo los hidrocarburos aromáticos?

- Nitración Pirólisis Hidrogenación

6. ¿De qué otra manera se les conoce a los hidrocarburos aromáticos?

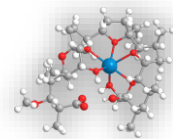
- Antraceno Arenos Alifáticos

7. ¿Qué tipo de elementos son los más comunes en los hidrocarburos heterocíclicos?

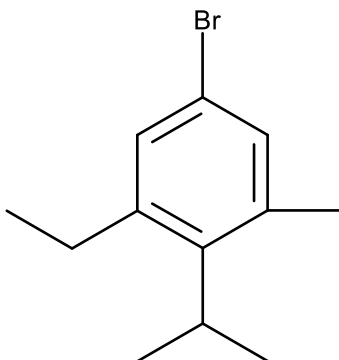
Oxígeno, Nitrógeno y Azufre.

8. ¿Qué tipo de hidrocarburo aromático es el 1-cloro-4-ciclopropilbenceno?

- Disustituído Policíclico Heterocíclico

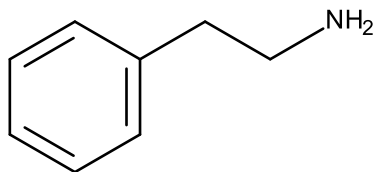


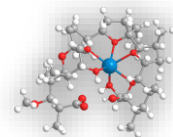
9. Nombre el siguiente hidrocarburo:



5-bromo-1-etil-2-isopropil-3-metilbenceno

10. Dibuje el hidrocarburo 2-fenietanamina.





7. GRUPOS FUNCIONALES

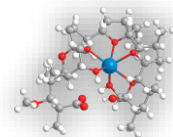
Un grupo funcional es un átomo o conjunto de átomos unidos a una cadena carbonada y que puede ser representada por R para los compuestos alifáticos, y como Ar para los compuestos aromáticos.

Los grupos funcionales son los responsables de la reactividad y de las propiedades químicas de los compuestos orgánicos.

En la **Tabla 11**, se muestran algunos de los grupos funcionales más usuales.

Tabla 11. Grupos funcionales más comunes en química orgánica.

Tipo de compuesto	Grupo funcional	Fórmula	Sustituyente
Halogenuro de alquilo	X=F, Cl, Br o I	R - X	R—X
Alcohol	Grupo hidroxilo	R - OH	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{R} \quad \text{H} \end{array}$
Éter	Grupo alcoxi	R - O - R'	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{R} \quad \text{R}' \end{array}$
Aldehído	Grupo carbonilo	R - C(=O)H	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\text{H} \end{array}$
Cetona	Grupo carbonilo	R - C(=O) - R'	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{R}_1-\text{C}-\text{R}_2 \end{array}$
Ácido carboxílico	Grupo carboxilo	R - COOH	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\text{OH} \end{array}$

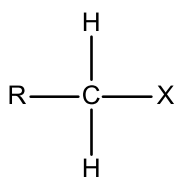


Tipo de compuesto	Grupo funcional	Fórmula	Sustituyente
Éster	Grupo acilo	$R - COOH - R'$	$\begin{array}{c} O \\ \\ R - C - OR' \end{array}$
Amina	Grupo amino	$R - NH_2$	$\begin{array}{c} R_1 \\ \\ R_3 - N \\ \\ R_2 \end{array}$
Amida	Grupo amido	$R - CO - NR_2$	$\begin{array}{c} O \\ \\ R - C - N - R'' \\ \\ R' \end{array}$

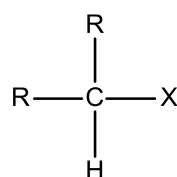
7.1 Halogenuros de alquilo

Los halogenuros de alquilo resultan de la unión de uno o varios átomos de halógeno a una cadena carbonada. Su fórmula general es $R-X$; siendo X el halógeno (por lo regular Cl o Br) y R el grupo alquilo.

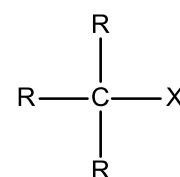
De acuerdo con el tipo de carbono que sea portador del halógeno, los halogenuros de alquilo se clasifican en: primarios, secundarios y terciarios (**Figura 55**):



Halogenuro primario

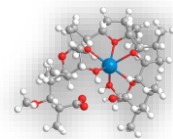


Halogenuro secundario



Halogenuro terciario

Figura 55. Tipos de Halogenuros



7.1.1 Propiedades

Algunas de las propiedades de compuestos halogenuros de alquilo se ven afectadas dependiendo del carbono al que estén unidos sus grupos funcionales.

- Punto de ebullición.- Las fuerzas de dispersión son las principales responsables de que el punto de ebullición de los halogenuros aumente con el incremento de tamaño del halógeno; los fluoruros tienen los puntos de ebullición menores, y los yoduros los mayores. Esto se debe a la polarizabilidad de un átomo, ya que dicha propiedad es más pronunciada cuando los electrones están más lejos del núcleo (yodo) que cuando están más cerca (flúor).
- Solubilidad.- Todos los halogenuros de alquilo son insolubles en agua.
- Densidad.- La mezcla de un halogenuro con agua se separa en dos capas; cuando el halogenuro es un fluoruro o un cloruro, el agua se encuentra en la capa inferior; y la situación se invierte cuando el halogenuro es un bromuro o un yoduro. Por lo tanto, los fluoruros y cloruros de alquilo son menos densos que el agua mientras que los yoduros y bromuros son más densos que la misma.

7.1.2 Nomenclatura

Para nombrar a los halogenuros de alquilo, se tienen dos nomenclaturas de acuerdo a las reglas de la IUPAC.

7.1.2.1 Nomenclatura funcional

En la nomenclatura funcional se numera la cadena iniciando con el carbono que está unido al halógeno y se nombran el grupo alquilo y halogenuro como palabras separadas. Ejemplos de éstos son (**Figura 56**):

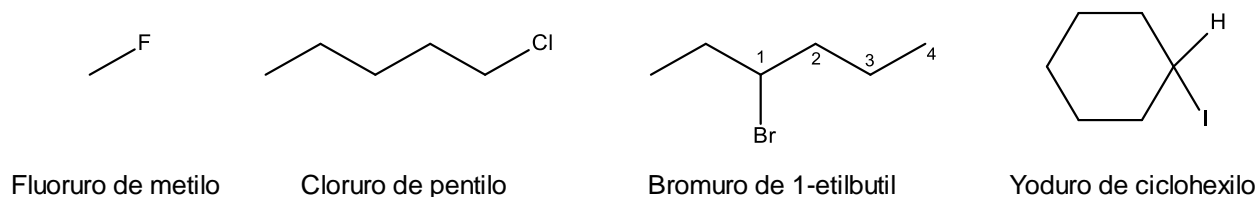
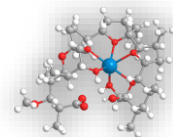


Figura 56. Ejemplos de Halogenuros con nomenclatura funcional.

7.1.2.2 Nomenclatura sustitutiva

La nomenclatura sustitutiva trata al halógeno como un sustituyente en una cadena de alcano. La cadena se numera de modo que el halógeno tenga el número más bajo, teniendo en cuenta que, para compuestos insaturados, los dobles y triples enlaces tienen prioridad sobre el halógeno al momento de asignar los localizadores de cadena. Algunos ejemplos son **(Figura 57)**:

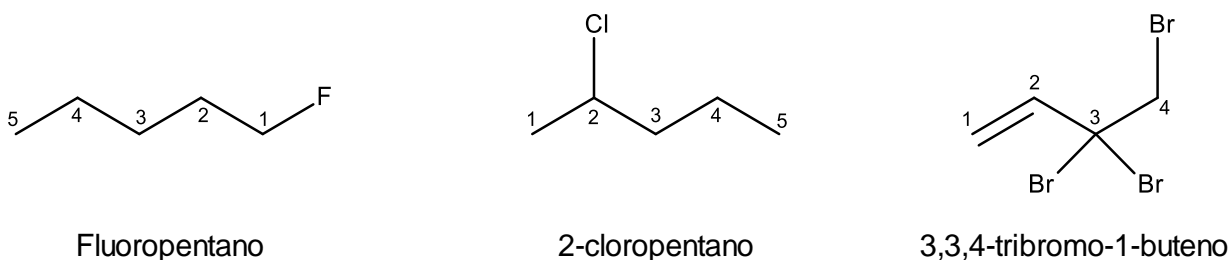
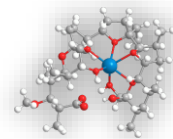


Figura 57. Numeración de cadena larga en Halogenuros

Los grupos alquilo se consideran de igual importancia que los halógenos, por lo que la cadena se numera de modo que se le dé el localizador más bajo al sustituyente más cercano al extremo de la cadena. Por ejemplo **(Figura 58)**:



Figura 58. Nombres de halogenuros con nomenclatura sustitutiva



7.2. Alcoholes

Los alcoholes son compuestos orgánicos que contienen grupos radicales hidroxilo (-OH). Con base en el grado de sustitución del carbono que lleva el grupo funcional, los alcoholes se clasifican en:

- **Primarios.**- El átomo de hidrógeno (H) sustituido por el grupo hidroxilo (-OH) pertenece a un carbono unido a 2 átomos de hidrógeno.
- **Secundarios.**- El átomo de hidrógeno (H) sustituido por el grupo hidroxilo (-OH) pertenece a un carbono unido a 1 átomo de hidrógeno.
- **Terciarios.**- el átomo de hidrógeno (H) sustituido por el grupo hidroxilo (-OH) pertenece a un solo carbono.

Ejemplos típicos para clasificación de alcoholes comunes son (**Figura 59**):

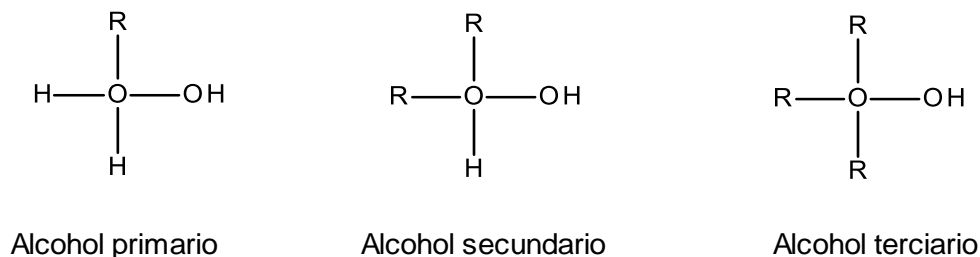
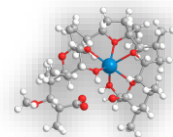


Figura 59. Tipos de alcoholes.

7.2.1 Propiedades

Muchas de las propiedades de los alcoholes se ven afectadas si sus grupos funcionales están unidos a carbonos primarios, secundarios o terciarios.

- **Punto de ebullición.**- Los puntos de ebullición de los alcoholes son influenciados por la polaridad del compuesto y la cantidad de puentes de hidrógeno. Los grupos OH presentes en un alcohol hacen que su punto de ebullición sea más alto que el de los hidrocarburos de su mismo peso molecular; en los alcoholes el punto de ebullición aumenta con la cantidad de átomos de carbono y disminuye



con el aumento de las ramificaciones. Todo esto está asociado con la dificultad de romper los puentes de hidrógeno que tiene el grupo OH.

- Punto de fusión.- Presenta el mismo comportamiento que el punto de ebullición a medida que aumenta el número de carbonos.
- Solubilidad en agua.- Los alcoholes de peso molecular bajo (metílico, etílico, n-propílico e isopropílico) son solubles en agua en todas proporciones y su capacidad para participar en puentes de hidrógeno intermoleculares aumenta su solubilidad en el agua. Los alcoholes superiores se vuelven menos solubles en agua. El término superiores está referido a alcoholes que tienen más de dos carbonos en la estructura.
- Densidad.- Todos los alcoholes líquidos tienen densidades de aproximadamente 0.8 g/mL y son, por consiguiente, menos densos que el agua.

7.2.2 Nomenclatura

De acuerdo a la IUPAC, para nombrar a los alcoholes se pueden utilizar tanto la nomenclatura funcional como la nomenclatura sustitutiva, siempre y cuando se defina cuál es la referencia.

7.2.2.1 Nomenclatura funcional

En este sistema se describe un alcohol como una molécula de agua en la que se ha sustituido uno de los átomos de hidrógeno por un grupo alquilo.

1. **Elegir la cadena principal:** La cadena principal será aquella de mayor longitud (**Figura 60**) que contenga el grupo (-OH):

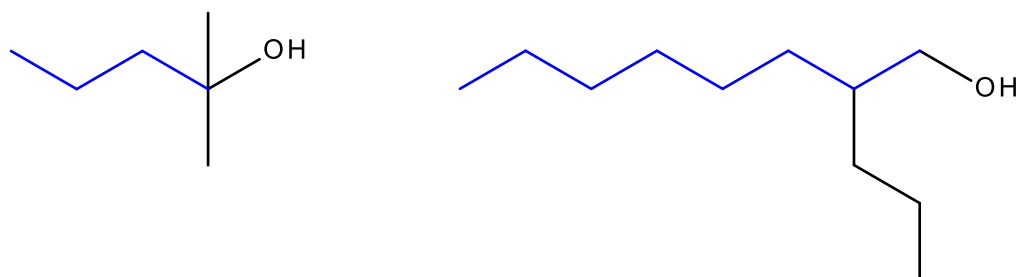
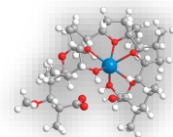


Figura 60. Cadena principal

2. **Numerar la cadena principal:** La cadena siempre se numera comenzando con el carbono al que está unido el grupo hidroxilo (**Figura 61**):

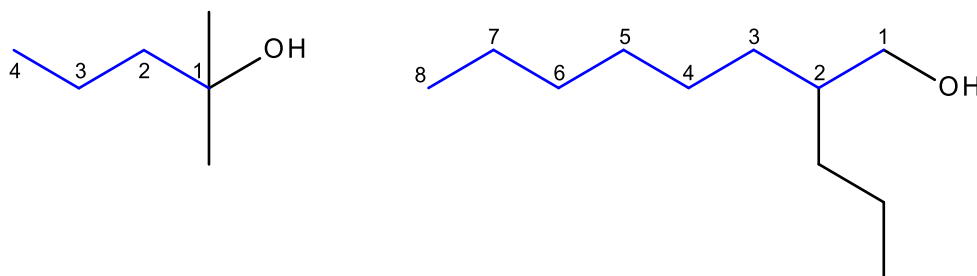


Figura 61. Numerar la cadena principal

3. **Nombrar el compuesto:** Los nombres de clase funcional de los alcoholes se derivan anteponiendo la palabra alcohol al nombre del grupo alquilo que lleva el sustituyente hidroxilo (-OH) y la terminación “*ílico*”, como palabras separadas (**Figura 62**):

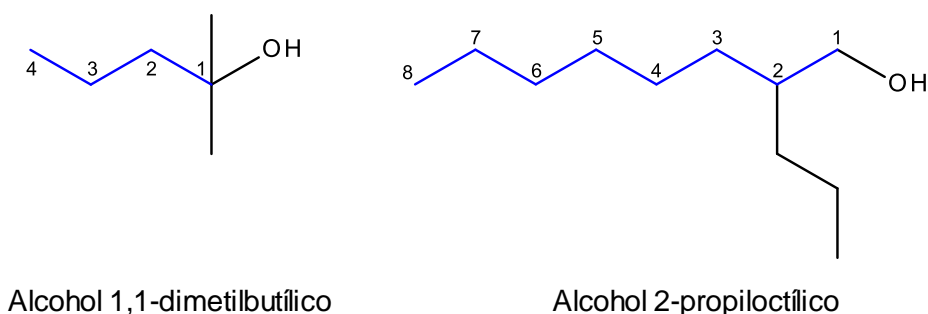
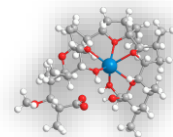


Figura 62. Nombre del compuesto



El uso de ésta nomenclatura se dificulta si la estructura de la molécula es compleja, en cuyo caso se recomienda utilizar la nomenclatura sustitutiva.

7.2.2.2 Nomenclatura sustitutiva

Las reglas para ésta nomenclatura son:

1. **Elegir la cadena principal:** Se escoge como cadena principal la de mayor longitud que contenga el grupo -OH (**Figura 63**):

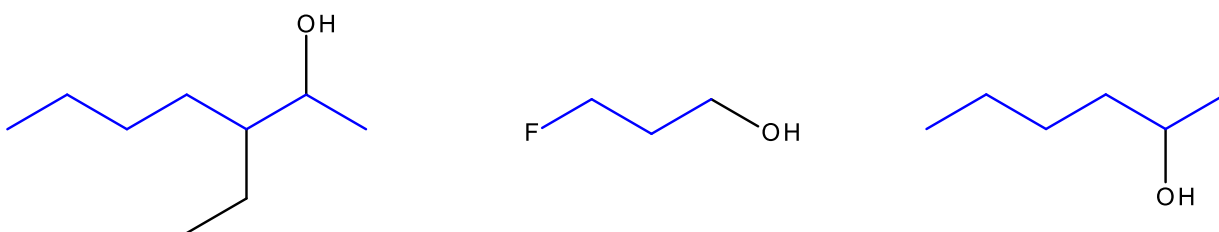


Figura 63. Cadena principal

2. **Numerar la cadena principal:** Se numera la cadena principal de modo que le sea asignado el localizador más bajo al grupo -OH ; en caso de haber sustituyentes, se debe de tener en cuenta que los grupos hidroxilo tienen prioridad sobre los grupos alquilo y los halógenos para determinar la dirección de la numeración de una cadena de carbonos (**Figura 64**):

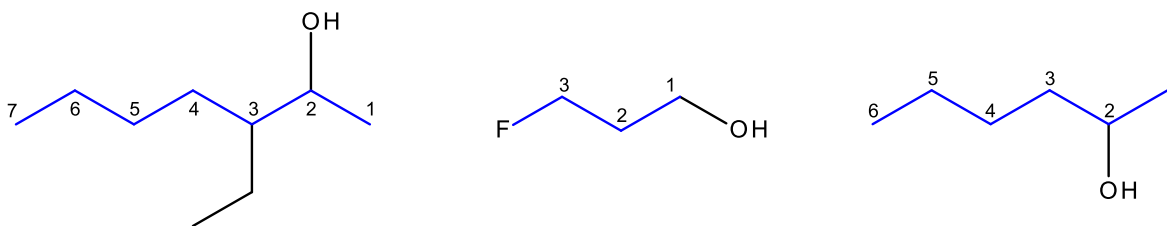
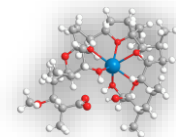


Figura 64. Numeración de la cadena principal

3. **Nombrar el compuesto:** En la nomenclatura sustitutiva de los alcoholes se reemplaza la terminación -o del alcano correspondiente por el sufijo -ol . La posición



del grupo hidroxilo se indica con un número, eligiendo la secuencia que asigna el localizador inferior al carbono que lleva al grupo hidroxilo (**Figura 65**):

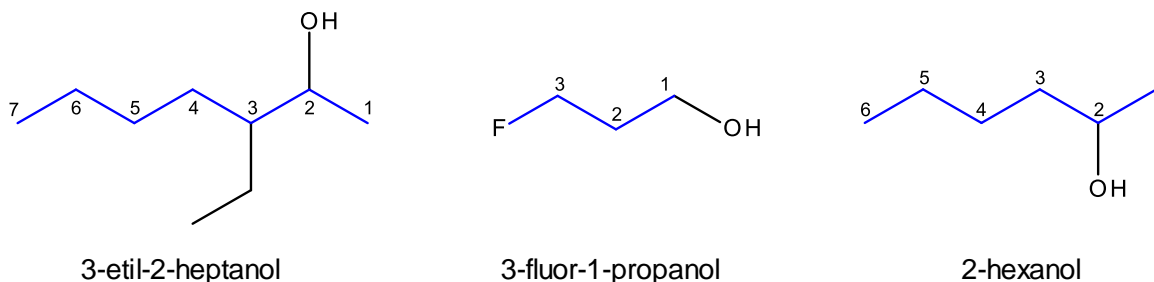


Figura 65. Nombre del compuesto

En caso de tener otros grupos funcionales en la molécula, el nombre del compuesto se asignará de acuerdo a la prioridad del alcohol.

El grupo $-OH$ es prioritario frente a alquenos, alquinos y halogenuros de alquilo, sin embargo, pasa a ser un sustituyente ante otros grupos funcionales (**Figura 66**). Ejemplos de esta categorización son:

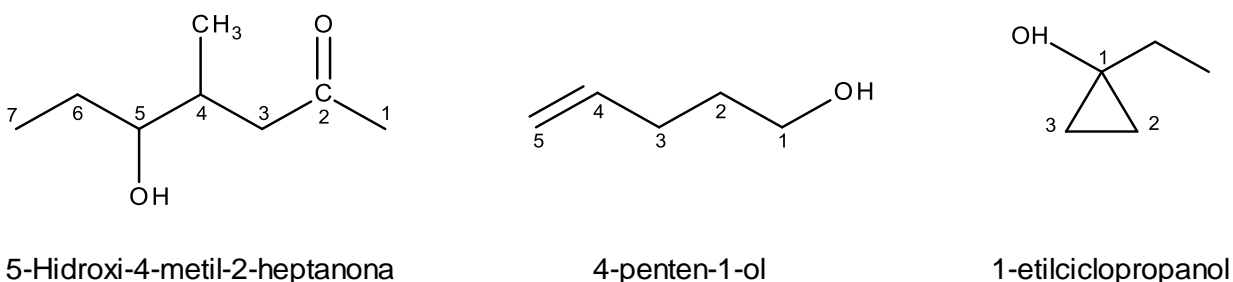
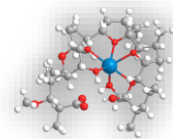


Figura 66. Nombre de alcoholes en compuestos con otros grupos funcionales

7.3 Éteres

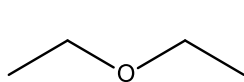
Los éteres son compuestos de fórmula $R-O-R'$ en la que R y R' pueden ser grupos alquilo o arilo. De acuerdo al tipo de radical, los éteres se clasifican como:

- Alifáticos.- Ambos radicales son alquílicos $R - O - R$.
- Aromáticos.- Los dos radicales son arílicos $Ar - O - Ar$.

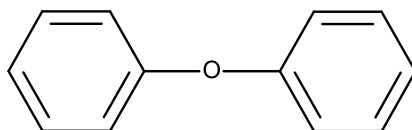


- Mixtos.- Un radical alquílico y otro arílico $R - O - Ar$.

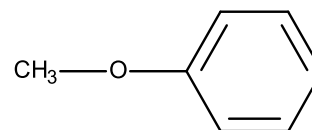
Ejemplos típicos para clasificación de éteres comunes son (**Figura 67**):



Éter alifático



Éter aromático



Éter mixto

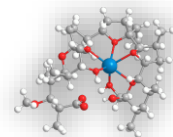
Figura 67. Éteres

7.3.1 Propiedades

Debido a la dificultad que presenta la ruptura del enlace C-O, los éteres tienen poca reactividad química, y por dicha razón es que son muy usados como disolventes en reacciones orgánicas.

Los éteres están relacionados con los alcoholes y se obtienen directamente de ellos. Son compuestos inertes y estables; la mayoría de ellos son líquidos y volátiles, ligeros e inflamables y no pueden establecer enlaces de hidrógeno consigo mismos. Las principales propiedades son:

- Punto de ebullición y fusión.- Debido a la falta de grupos $-OH$, los éteres se parecen a los alcanos, en donde las fuerzas de dispersión son los factores más importantes en las atracciones moleculares, por lo que sus puntos de ebullición y de fusión son menores a los de los alcoholes.
- Solubilidad en agua.- Los éteres se disuelven en la misma cantidad que los alcoholes; dicha solubilidad se debe a los puentes de hidrógeno que se establecen entre los hidrógenos del agua y el oxígeno del éter.



7.3.2 Nomenclatura

Al igual que los alcoholes y los halogenuros de alquilo, para nombrar a los éteres utilizaremos la nomenclatura funcional y la sustitutiva.

7.3.2.1 Nomenclatura funcional

Los nombres de los éteres como clase funcional se derivan poniendo primero la palabra éter y después mencionando los dos grupos alquilo de la estructura general ROR', en orden alfabético como palabras separadas, y el último grupo con la terminación "ílico".

En caso de que los grupos alquilo sean iguales, se utiliza el prefijo di, el cual antecede al grupo alquilo con la terminación "ílico" (**Figura 68**). Como ejemplo se tiene:

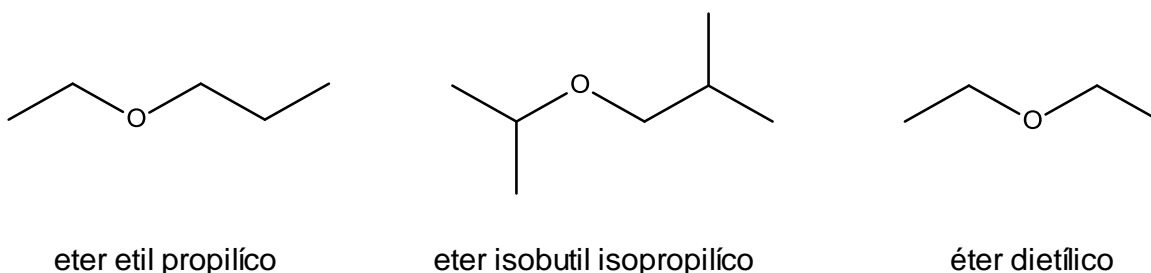


Figura 68. Ejemplos de éteres

Es común, que lo anterior solo se utilice para los éteres simples (éter dietílico o éter dimetílico), y el resto se nombren iniciando con los dos grupos alquilo y finalizando con la palabra éter (**Figura 69**). Por ejemplo:

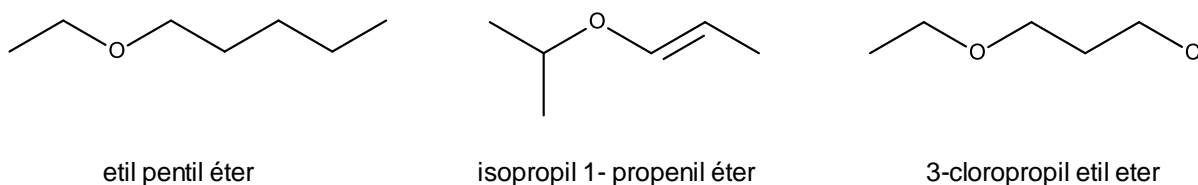
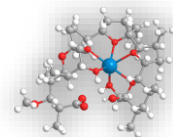


Figura 69. Nomenclatura de éteres complejos



7.3.2.2 Nomenclatura sustitutiva

En ésta nomenclatura, los éteres pueden nombrarse como “alcoxi” derivados de alcanos.

1. **Elegir y numerar la cadena principal:** Se toma como cadena principal la de mayor longitud (**Figura 70**):

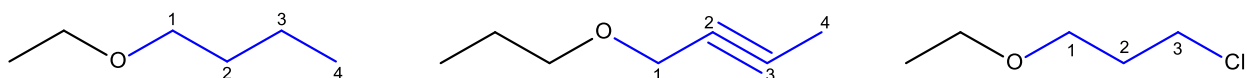


Figura 70. Numeración de la cadena principal

2. **Nombrar el compuesto:** Se inicia con el localizador del carbono al que está unido el oxígeno de la cadena principal, seguido del alcóxido como sustituyente y finalizando con el nombre del compuesto de la cadena principal (**Figura 71**):

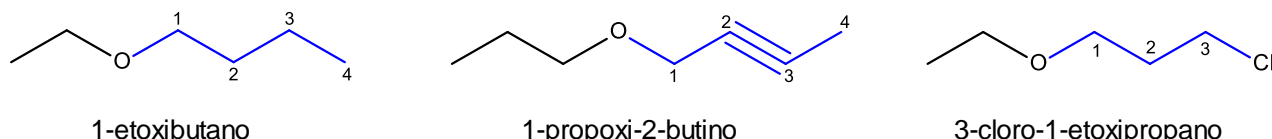
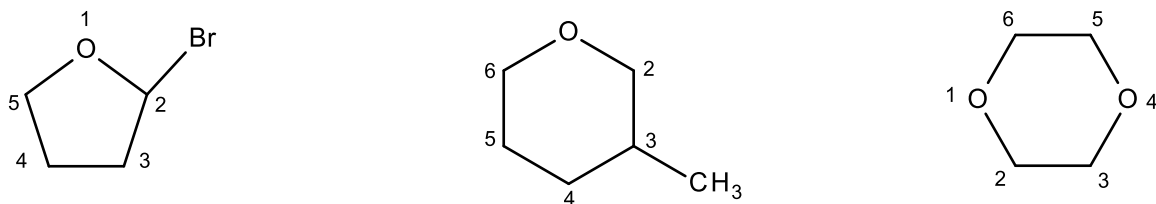


Figura 71. Nomenclatura sustitutiva de los compuestos.

Los éteres cíclicos tienen el oxígeno como parte de su anillo; son compuestos heterocíclicos. Para nombrarlos, el anillo se numera comenzando con el oxígeno y se nombra con el prefijo *-oxa*, seguido del nombre del ciclo (**Figura 72**). Por ejemplo:

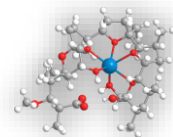


2-Bromooxaciclopentano

3-Metiloxaciclohexano

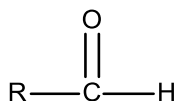
1,4-Dioxano

Figura 72. Éteres cíclicos.



7.4 Aldehídos

Los aldehídos son compuestos orgánicos que resultan de la oxidación suave y la deshidratación de los alcoholes primarios; se caracterizan por tener un grupo alquilo y un átomo de hidrógeno enlazado al grupo carbonilo, siendo su estructura general:

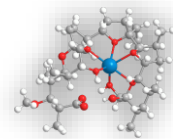


Las reacciones químicas de los aldehídos están en función de su grupo carbonilo.

7.4.1 Propiedades

Entre las propiedades más destacables de los aldehídos, además de su buena reactividad, se tiene:

- Punto de ebullición y fusión.- La polaridad de los aldehídos y la intensidad de las fuerzas de atracción dipolo-dipolo entre las moléculas, ocasionan que los puntos de ebullición y fusión de los aldehídos sean mayores a los de los alquenos. Sin embargo son menores a los de los alcoholes debido a la ausencia de formación de puentes de hidrógeno intramoleculares en estos compuestos.
- Solubilidad en agua.- Los aldehídos son menos solubles que los alcoholes, pero son más solubles que los alquenos debido a que pueden formar puentes de hidrógeno con los protones del grupo OH; a pesar de ello y, de que los aldehídos son principalmente polares, conforme aumenta el número de carbonos la solubilidad va disminuyendo.
- Densidad.- La densidad de los aldehídos incrementa de acuerdo al aumento del número de carbonos.



7.4.2 Nomenclatura

1. **Elegir y numerar la cadena principal:** La cadena principal será la cadena continúa más larga que contenga el grupo y para numerarla, se inicia con el mismo (**Figura 73**):

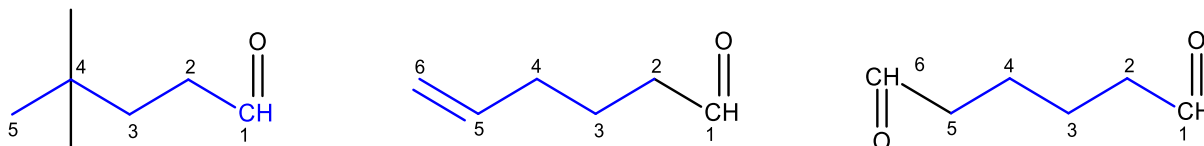


Figura 73. Numeración de la cadena principal.

2. **Nombrar el compuesto:** Para nombrar a los aldehídos, la terminación $-o$ del nombre del alcano correspondiente se sustituye por $-al$, y los sustituyentes se especifican de la manera en que se acostumbra (**Figura 74**).

En caso de que el compuesto contenga dos funciones aldehído, se agregará el sufijo $-dial$ al nombre del alcano:

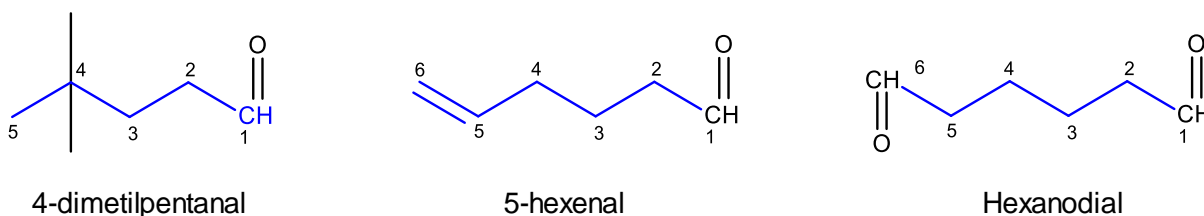
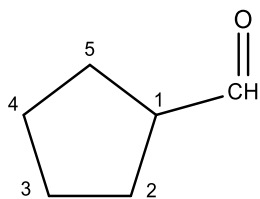
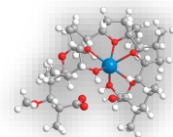
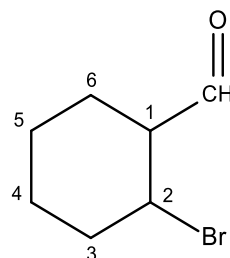


Figura 74. Nombre de los aldehídos.

Cuando el grupo $-CH = O$ está unido a un anillo, el anillo se nombra con el sufijo carbaldehído y para numerar el ciclo, se da el localizador 1 al carbono que contiene el grupo aldehído (**Figura 75**):



Ciclopentanocarbaldehído

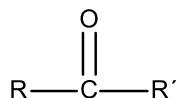


2-Bromociclohexanocarbaldehído

Figura 75. Aldehídos cíclicos.

7.5 Cetonas

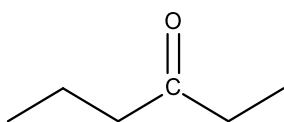
Las cetonas son compuestos orgánicos que se caracterizan por tener un grupo funcional carbonilo unido a dos grupos alquilo o arilo. Su estructura general es:



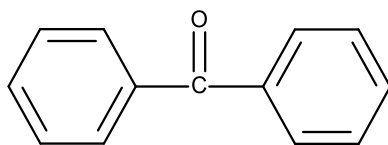
Se clasifican en:

- Alifáticas.- Los radicales son alquílicos $\text{R} - \text{O} - \text{R}$.
- Aromáticas.- Los radicales son arílicos $\text{Ar} - \text{O} - \text{Ar}$.
- Mixtas.- Uno de los radicales es alquílico y el otro arílico $\text{R} - \text{O} - \text{Ar}$.

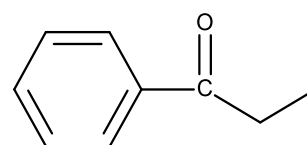
Ejemplos típicos para clasificación de cetonas comunes son (**Figura 76**):



Cetona alifática

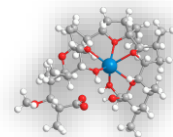


Cetona aromática



Cetona mixta

Figura 76. Tipos de cetonas



7.5.1 Propiedades

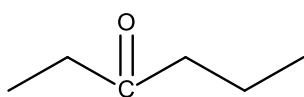
Las cetonas resultan de la oxidación de los alcoholes secundarios y, debido al grupo carbonilo, son menos reactivas que los aldehídos, sin embargo, sus propiedades químicas son similares a los de éstos.

7.5.2 Nomenclatura

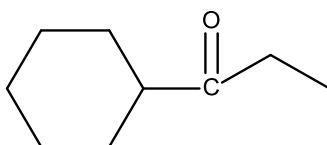
A diferencia de los aldehídos, las cetonas se pueden nombrar con la nomenclatura funcional y la sustitutiva, aunque se prefiere hacer uso de ésta última.

7.5.2.1 Nomenclatura funcional

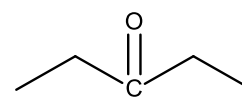
En esta nomenclatura, los grupos unidos al grupo carbonilo se nombran en orden alfabético y como palabras separadas, seguidas de la palabra cetona (**Figura 77**):



etil propil cetona



ciclohexil etil cetona



Dietil cetona

Figura 77. Nomenclatura funcional de cetonas

7.5.2.2 Nomenclatura sustitutiva

1. **Elegir y numerar la cadena principal.**- la cadena principal será aquella de mayor longitud que contenga el grupo y se numera de modo que éste tome el localizador más bajo. En una cetona cíclica el C-1 se le asignará el grupo carbonilo el localizador 1, y el número no aparecerá en el nombre (**Figura 78**). Por ejemplo:

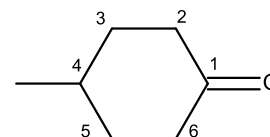
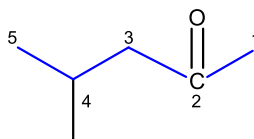
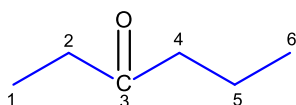
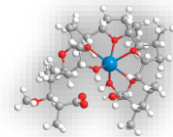
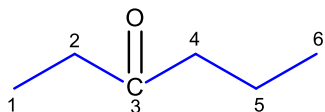


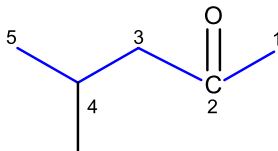
Figura 78. Numeración de la cadena principal.



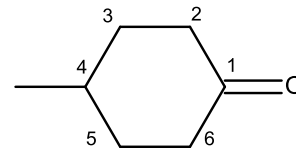
2. Nombrar el compuesto.- Las cetonas se nombran sustituyendo la terminación del alcano correspondiente por la palabra “ona” (**Figura 79**):



3- hexanona



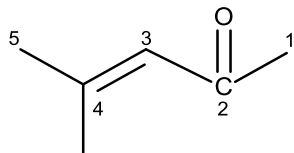
4-metil-2-pentanona



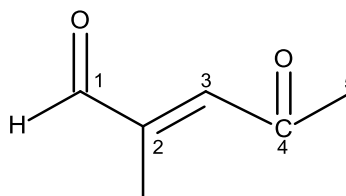
4-metil-ciclohexanona

Figura 79. Nombre de cetonas.

Al igual que los aldehídos, la cetona tiene prioridad sobre alcoholes, dobles enlaces, halógenos y grupos alquilo, sin embargo los aldehídos tienen prioridad sobre las cetonas; en caso de que la cetona sea un sustituyente, se utilizará la palabra “oxo” en la cadena principal (**Figura 80**). Para ejemplificar:



4-metil-3-penten-2-ona

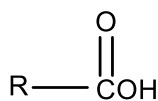


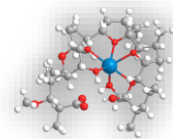
2-metil-4-oxopentanal

Figura 80. Nombre de compuesto con varios grupos funcionales.

7.6 Ácidos carboxílicos

Los ácidos carboxílicos constituyen una de las clases de compuestos que se encuentran con más frecuencia en la naturaleza, particularmente en los seres vivos, éstos se caracterizan por contener el grupo carboxilo COOH. La estructura general es:





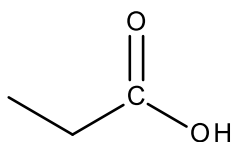
7.6.1 Propiedades

Los ácidos carboxílicos son moléculas con geometría trigonal plana; presentan hidrógeno ácido en el grupo hidroxilo y se comportan como bases sobre el oxígeno carbonílico. Las propiedades de este grupo son:

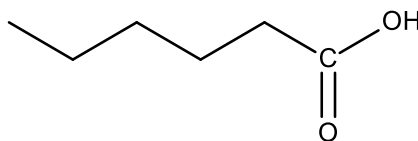
- Puntos de ebullición y de fusión.- los puntos de fusión y ebullición de los ácidos carboxílicos indican la presencia de grandes fuerzas moleculares de atracción, por lo que son mayores que los de los hidrocarburos y los compuestos orgánicos oxigenados de tamaño y forma comparables.
- Solubilidad.-la solubilidad diferencial en agua de los ácidos carboxílicos se debe a los puentes de hidrógeno que forman con la misma. Con cuatro o menos átomos de carbono son miscibles en agua en todas proporciones, con cinco carbonos son parcialmente solubles y mayores a cinco son insolubles.

7.6.2 Nomenclatura

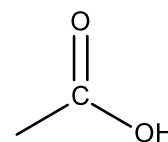
En la nomenclatura sistemática de los ácidos carboxílicos se inicia con la palabra ácido, seguida del nombre de la cadena continua más larga que contenga el grupo carboxilo, y se finaliza sustituyendo la terminación del alcano correspondiente por -oico (**Figura 81**):



Ácido propanoico

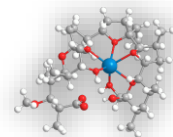


Ácido hexanoico



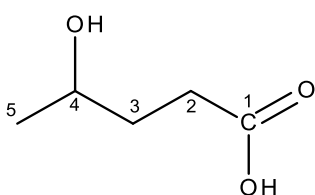
Ácido etanoico

Figura 81. Ejemplos de ácidos carboxílicos

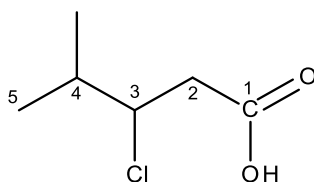


Cuando se tienen sustituyentes, su localización se indica con un número, y la numeración de la cadena de carbonos inicia en el grupo carboxilo. Para nombrarlos, se debe de tener en cuenta la importancia que tienen para la numeración de la cadena principal, ya que son prioritarios frente a todos los demás grupos funcionales (**Figura 82**).

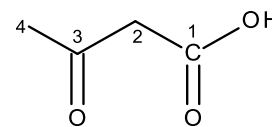
Ejemplos de estos compuestos son:



Ácido 4-hidroxipentanoico



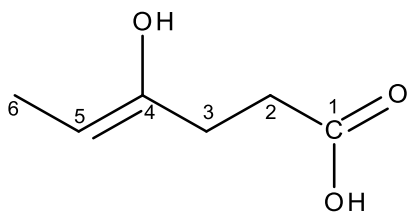
Ácido 3-cloro-4-metil pentanoico



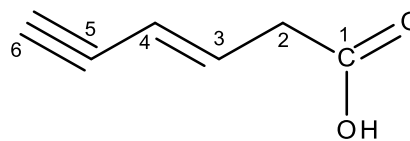
Ácido 3-oxobutanoico

Figura 82. Ácidos carboxílicos con sustituyentes.

En caso de tener dobles o triples enlaces en la cadena principal, se utilizarán las terminaciones -enoico e -inoico respectivamente (**Figura 83**):



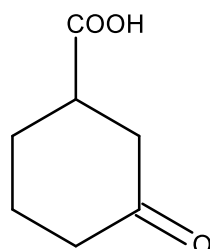
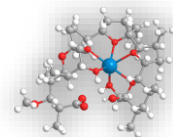
Ácido hex-4-enoico



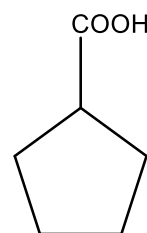
Ácido hex-3-en-5-inoico

Figura 83. Nombre de ácidos carboxílicos

Si el grupo carboxilo está unido a un anillo, se menciona primero la palabra ácido, seguido del nombre del anillo y finalizando con el sufijo -carboxílico (**Figura 84**), por ejemplo:



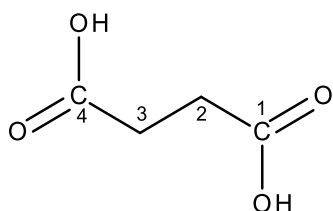
Ácido 3-oxociclohexanocarboxílico



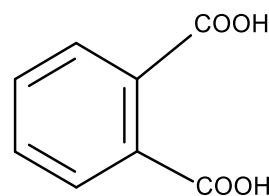
Ácido ciclopentanocarboxílico

Figura 84. Ácidos carboxílicos cíclicos

En caso que la molécula posea dos grupos carboxilo, se utiliza el sufijo dioico o dicarboxílico para estructuras cíclicas, según sea el caso (**Figura 85**). Por ejemplo:



Ácido butanodioico

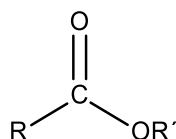


Ácido 1,2-benzenodicarboxílico

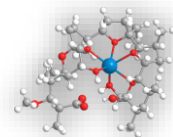
Figura 85. Compuestos con dos grupos carboxílicos.

7.7 Ésteres

Los ésteres son compuestos orgánicos producidos por la reacción entre un alcohol y un ácido carboxílico. Su fórmula general es:



Los ésteres se encuentran frecuentemente en productos naturales de origen animal y vegetal, y son los principales causantes de los aromas de frutas, flores y aceites esenciales.

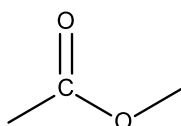


7.7.1 Propiedades

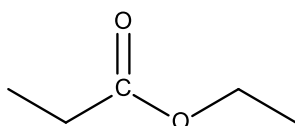
Debido a que no pueden formar puentes de hidrógeno, los ésteres son más volátiles que los alcoholes y los ácidos con igual peso molecular. Son de olor agradable y sus puntos de ebullición y de fusión aumentan conforme incrementa su peso molecular. Son menos densos que el agua y su solubilidad en la misma depende de la longitud de la cadena hidrocarbonada.

7.7.2 Nomenclatura

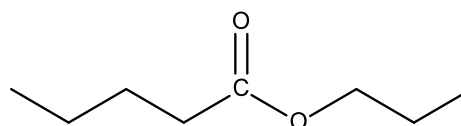
Para nombrar a los ésteres, iniciaremos nombrando el radical de la cadena unida al carbono utilizando la terminación *-oato* y finalizando con el nombre del grupo alquilo unido al oxígeno (**Figura 86**). Ejemplos típicos de estos compuestos son:



Etanoato de metilo



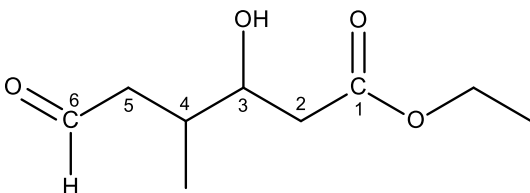
Propanoato de etilo



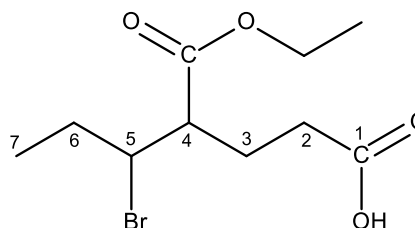
Pentanoato de propilo

Figura 86. Nombres de Ésteres

Los ésteres son prioritarios frente a casi todos los grupos funcionales, exceptuando a los ácidos carboxílicos y los anhídridos, por lo que pasa a ser un sustituyente ante estos últimos, y para nombrarlos se utiliza la palabra *-alcoxicarbonil* (**Figura 87**). Dos ejemplos comunes son:

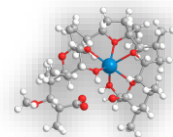


3-hidroxi-4-metil-6-oxohexanoato de etilo

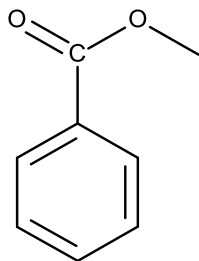


Ácido 5-bromo-4-etoxicarbonilheptanoico

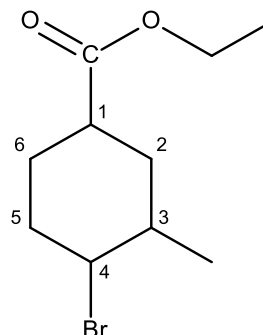
Figura 87. Nombre de compuesto con varios grupos funcionales.



Cuando el grupo éster va unido a un ciclo, se nombra el ciclo como cadena principal y se emplea la terminación *-carboxilato* de alquilo para nombrar al éster (**Figura 88**).



Bencenocarboxilato de metilo



4-bromo-3-metilciclohexanocarboxilato de etilo

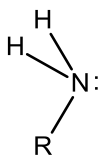
Figura 88. Nombres de ésteres con ciclos.

7.8 Aminas

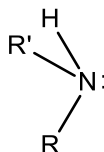
Las aminas son derivados alquilados del amoníaco (NH_3) que, a pesar de ser bases débiles, son las bases sin carga más fuertes que se encuentran en cantidades importantes bajo condiciones fisiológicas y que participan en las reacciones biológicas ácido-base. Las aminas se clasifican de acuerdo cuantos grupos de carbono están unidos al átomo de nitrógeno:

- 1) Amina primaria.- amina con un carbono unido al nitrógeno.
- 2) Amina secundaria.- amina con dos carbonos unidos al nitrógeno.
- 3) Amina terciaria.- amina con tres carbonos unidos al nitrógeno.

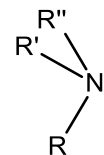
Ejemplos típicos de clasificación de aminas comunes (**Figura 89**):



Amina primaria

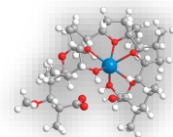


Amina secundaria



Amina terciaria

Figura 89. Tipos de aminas.



Los grupos unidos al nitrógeno pueden ser cualquier combinación de grupos alquilo o arilo.

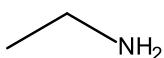
7.8.1 Propiedades

Las aminas son compuestos que se oxidan con facilidad y que presentan un olor similar al del amoníaco. Las aminas aromáticas son muy tóxicas y se sorben a través de la piel.

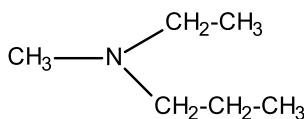
- Puntos de ebullición.- las aminas tienen puntos de ebullición mayores a los de los alcanos, pero menores a los de los alcoholes. Esto se debe a las interacciones dipolo-dipolo y a los puentes de hidrógeno que tienen las aminas, pero que no tienen los alcanos; sin embargo, debido a que el nitrógeno es menos electronegativo que el oxígeno, los puentes de hidrógeno son más débiles en las aminas que en los alcoholes.
- Solubilidad.- las aminas primarias y secundarias participan en la formación de puentes de hidrógeno entre sí y con el agua, y es por ello que son solubles en ella, sin embargo la solubilidad disminuye en las moléculas que tienen más de 6 átomos de carbono y en las que poseen anillo aromático.

7.8.2 Nomenclatura

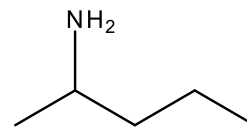
1. Alquilaminas.- se agrega la terminación amina al nombre del grupo alquilo que lleva el nitrógeno (**Figura 90**):



Etilamina

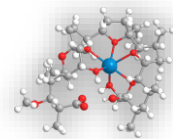


Etilmetilpropilamina

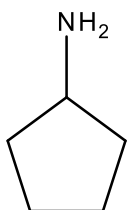


1-metilbutilamina

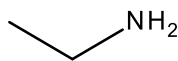
Figura 90. Alquilaminas



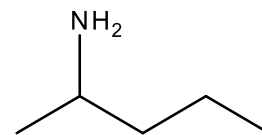
2. Alcalaminas.- el grupo alquilo se escribe como un alcano, y la terminación *-e* se sustituye por *-amina*, (**Figura 91**). Ejemplos de estos compuestos nitrogenados son:



Ciclopentanamina



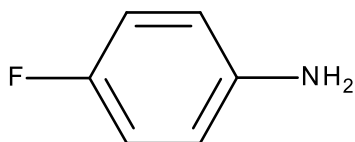
Etanamina



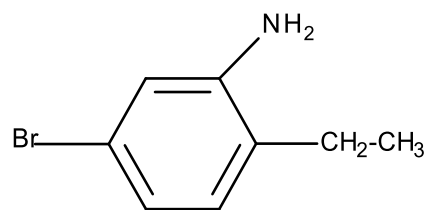
2-pentanamina

Figura 91. Tipos de aminas.

Si se tienen derivados del benceno, el nombre base que utiliza la IUPAC es “anilina”, y de tener sustituyentes, éstos se mencionan en orden alfabético (**Figura 92**):



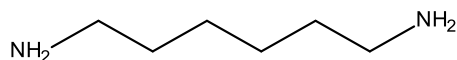
4-fluoroanilina



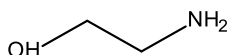
5-bromo-2-etilanilina

Figura 92. Nombre de las aminas en presencia de benceno.

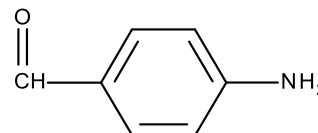
Los compuestos con dos grupos amino se nombran agregando el sufijo *-diamina* al nombre correspondiente; a su vez, debido a la baja prioridad que tienen las aminas frente a otros grupos funcionales, éstas pasan a nombrarse como *-amino* (**Figura 93**).



1,6-hexandiamina

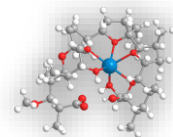


2-aminoetanol



4-aminobencenocarbaldehído

Figura 93. Nombre de aminas en presencia de otros grupos funcionales.



Para las aminas secundarias y terciarias, los nombres se asignan como derivados N-sustituidos de las aminas primarias. La amina primaria es la que tiene la cadena de hidrocarburos más larga, el prefijo N- se agrega como localizador cuando es necesario, para identificar a los sustituyentes en el nitrógeno del radical amino (**Figura 94**):

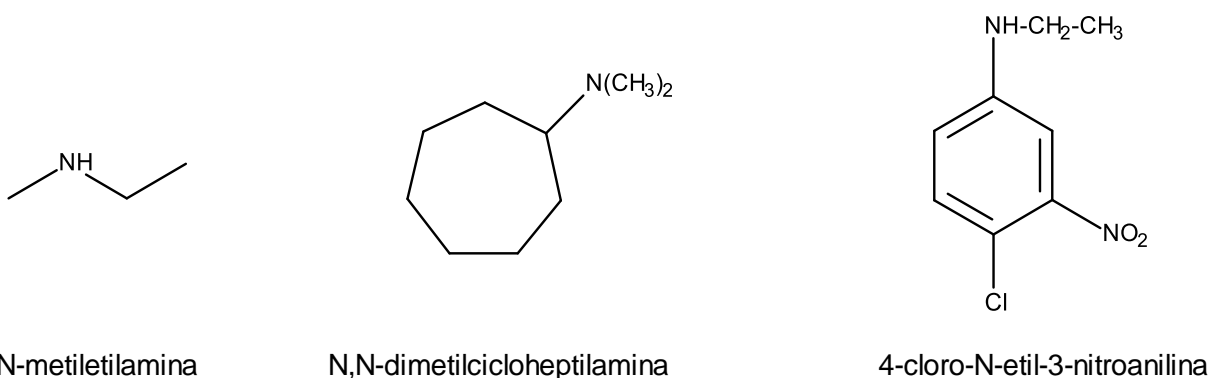


Figura 94. Prefijos para las aminas.

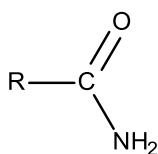
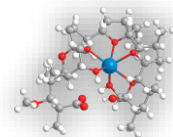
7.9 Amidas

Las amidas son compuestos orgánicos formados por un grupo carbonilo y un grupo amino (-CONH₂). Se consideran derivados de la condensación de un ácido carboxílico y una amina.

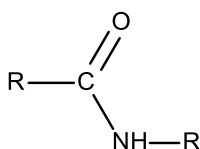
De acuerdo a la naturaleza del radical ácido que sustituye al hidrógeno, las aminas se clasifican en:

- Amidas primarias.- un radical unido al nitrógeno.
- Amidas secundarias.- dos radicales unidos al nitrógeno.
- Amidas terciarias.- tres radicales unidos al nitrógeno.

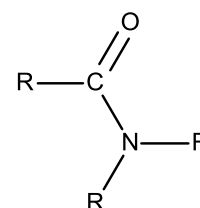
Ejemplos típicos de clasificación de amidas comunes (**Figura 95**):



Amida primaria



Amida secundaria



Amida terciaria

Figura 95. Tipos de amidas.

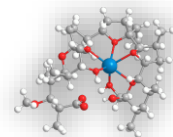
7.9.1 Propiedades

Las propiedades de las amidas varían de acuerdo al tipo de amida que se tenga:

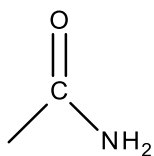
- Puntos de ebullición y de fusión.- las amidas primarias tienen puntos de ebullición y fusión mayores a los de los ácidos correspondientes, esto se debe a la asociación intermolecular a través de enlaces de hidrógeno; sin embargo, los de las amidas secundarias son menores debido al impedimento estérico del radical unido al nitrógeno para la asociación, y como las amidas terciarias no pueden asociarse, sus puntos de ebullición y fusión van de acuerdo a su peso molecular.
- Solubilidad.- las amidas son solubles en alcohol y en éter, pero solo las amidas primarias son solubles en agua.

7.9.2 Nomenclatura

Las amidas se nombran sustituyendo la terminación *-oico* del ácido carboxílico del cual derivan, por la terminación *-amida* y sin la palabra ácido. Los sustituyentes unidos al nitrógeno, al igual que las aminas, se identifican con la letra N (**Figura 96**):

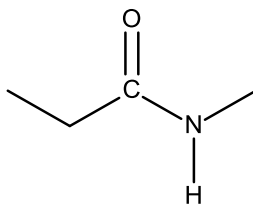


Amida primaria



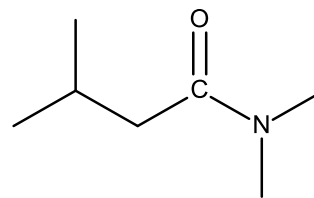
Metilamida

Amida secundaria



N-Metilpropilamida

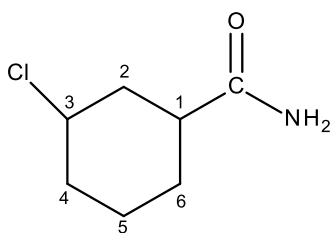
Amida terciaria



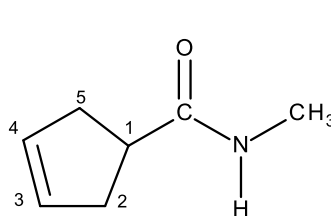
N,N,3-trimetilbutanamida

Figura 96. Nombre de aminas.

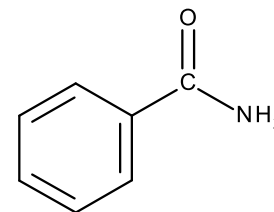
En el caso de moléculas estructuralmente cerradas, cuando el grupo amida va unido a un ciclo, el ciclo se nombra como cadena principal y se asignará el localizador 1 al carbono del ciclo al cual está unido al grupo amida y se añade el sufijo carboxamida al nombre del ciclo correspondiente (**Figura 97**). Ejemplos de este tipo de compuestos son:



3-Clorociclohexanocarboximida



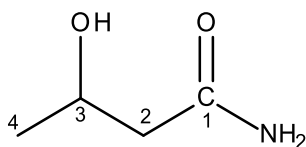
N-metilciclopenten-3-enocarboxamida



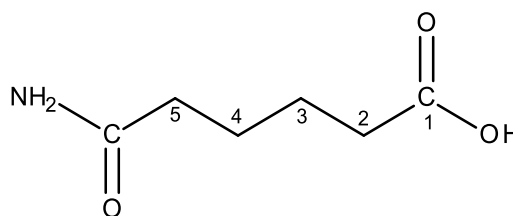
Bencenocarboxamida

Figura 97. Amidas unidas a un ciclo

Las amidas son prioritarias frente a aminas, alcoholes, cetonas, aldehídos y nitrilos y, en caso de ser sustituyentes, se nombran como carbomoíl (**Figura 98**), como los siguientes:

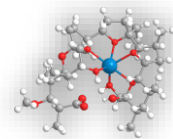


3-hidroxibutanamida



Ácido 5-carbomoílpentanoico

Figura 98. Nombre de amidas con otros grupos funcionales en la cadena.

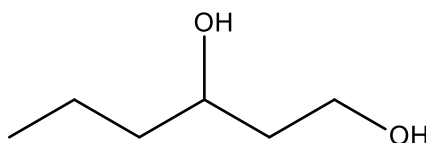


7.10 Ejercicios

1. ¿Qué tipo de compuesto representa la fórmula R-COOH?

- Alcohol Éter Ácido carboxílico

2. Nombre el siguiente compuesto:



1,3-hexanodiol

3. ¿A qué grupo funcional le corresponde la terminación “ol”?

- Amidas Alcohol Aminas

4. ¿Cuándo es que se utiliza el prefijo –oxa para nombrar a los éteres?

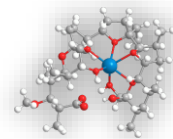
Cuando el oxígeno es parte de un hidrocarburo de cadena cerrada.

5. Son compuestos que resultan de la oxidación y deshidratación de alcoholes primarios:

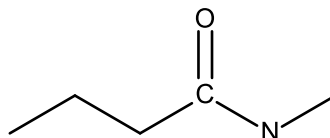
- Aldehídos Cetonas Éteres

6. ¿Cómo se clasifican las cetonas?

De acuerdo a su radical, las cetonas pueden ser alifáticas, aromáticas y mixtas.



7. Dibuje la estructura de M-metilbutanamida



8. ¿Qué diferencia hay entre las alquilaminas y las alcalaminas?

En las primeras se agrega la terminación amina al grupo alquilo y en las segundas el grupo alquilo se escribe como un alcano.

9. ¿Cuál es el grupo funcional de los ésteres?

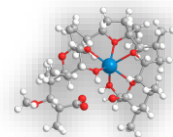
Acilo

Carbonilo

Amino

10. ¿Cómo se nombra un compuesto si se tiene más de un grupo funcional?

Si coexisten varios grupos funcionales en un compuesto, la terminación del mismo será la de grupo funcional principal con el siguiente orden de prioridad: ácidos carboxílicos, ésteres, amidas, aldehídos, cetonas, alcoholes, fenoles, aminas, éteres, alquenos, alquinos y alcanos y halogenuros de alquilo.



8. FRACCIONAMIENTO SARA

Existen diferentes métodos para caracterizar petróleo. Uno de los más usados es el análisis S.A.R.A, el cual se encarga de clasificar a crudos a través de una técnica de fraccionamiento que divide el petróleo en cuatro fases principales de acuerdo a su solubilidad y polaridad y las cuales se muestran a continuación (**Figura 99**).

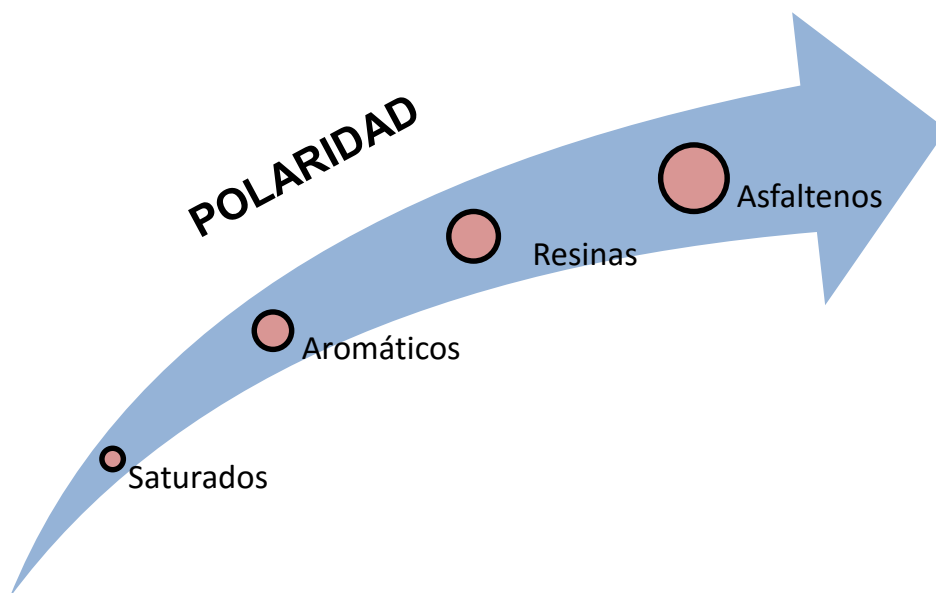
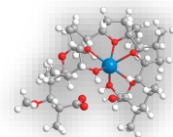


Figura 99. Fracciones del Análisis SARA de acuerdo a su grado de polaridad.

8.1 Saturados

Los compuestos saturados se encuentran formados únicamente por carbono e hidrógeno, son aceites blancos no polares constituidos por hidrocarburos alifáticos lineales o con cadenas laterales alifáticas y aromáticas. Los hidrocarburos saturados son la fracción menos polar y consisten principalmente en parafinas y cicloparafinas. En términos generales su peso molecular oscila entre 300 y 600 g/mol, con densidades entre 800 y 900 kg/m³ y parámetros de solubilidad entre 15 y 16 MPa^{0.5}.



En los petróleos crudos, la parte cíclica consiste comúnmente de anillos de cinco o seis átomos de carbono, en donde cada átomo de hidrógeno puede ser sustituido por grupos alquilo (**Figura 100**).

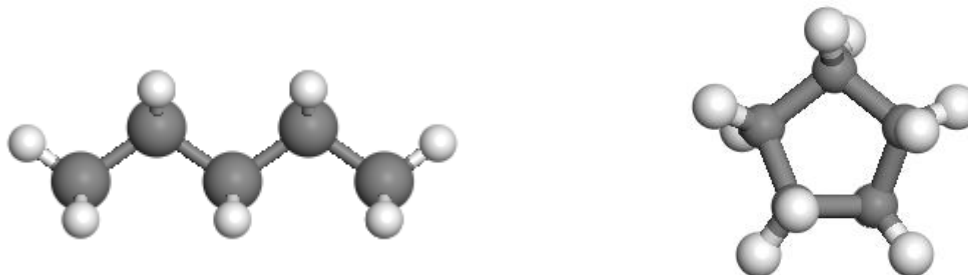


Figura 100. Ejemplo de estructuras de parafina y cicloparafina

8.2 Aromáticos

Los aromáticos consisten en cadenas no polares de carbono en las que denominan sistemas de anillos insaturados. Tienen gran capacidad de disolver otros hidrocarburos de alto peso molecular, algunos pueden tener anillos nafténicos unidos al anillo aromático (**Figura 101**). Son líquidos viscosos con una coloración marrón o anaranjada. Su peso molecular se encuentra entre 300 y 800 g/mol, con densidades de entre 950 y 1050 kg/cm³ y parámetros de solubilidad entre 19 y 20 MPa^{0.5}.

Debido a las propiedades que los enlaces les confieren, los hidrocarburos aromáticos (Figura 101) como el benceno, tolueno y xilenos son materias primas fundamentales en la petroquímica, además de que contribuyen a aumentar el octanaje en las gasolinas; sin embargo, los aromáticos homólogos superiores representan grandes problemas a la salud y al medio ambiente.

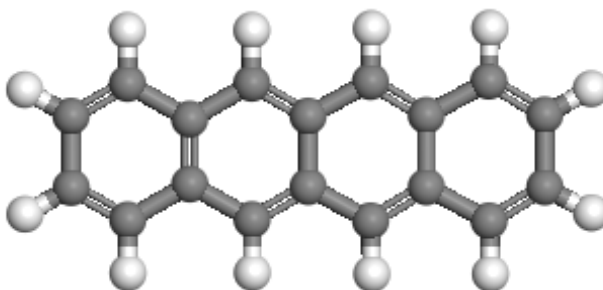
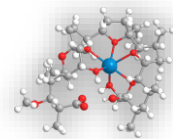


Figura101. Ejemplo de estructura de hidrocarburo aromático



8.3 Resinas

Las resinas son compuestos con gran cantidad de anillos aromáticos y cadenas laterales nafténicas y parafínicas, por lo tanto tienen una elevada cantidad de hidrógeno y carbono con pequeñas cantidades de oxígeno, azufre y nitrógeno (**Figura 102**). Son sólidos negros, quebradizos y brillantes y constituyen el componente polar no volátil del petróleo; son solubles en *n*-alcanos e insolubles en propano líquido.

El peso molecular de las resinas oscila entre 700 y 1,300 g/mol, con densidades aproximadas de 1,050 kg/m³ y parámetros de solubilidad de $20 \pm 0.5 \text{ MPa}^{0.5}$.

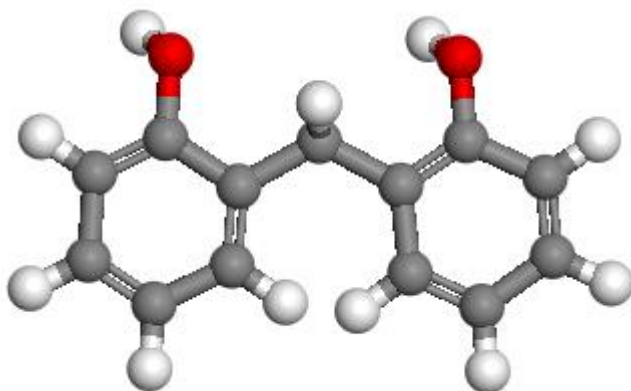
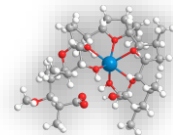


Figura 102. Estructura típica de una resina

8.4 Asfaltenos

Los Asfaltenos son hidrocarburos aromáticos altamente polares y de elevado peso molecular y que abarcan un amplio rango de composiciones (**Figura 103**), por ejemplo el alquitrán. Son sólidos amorfos de color marrón oscuro o negro, insolubles en *n*-alcanos como el *n*-pentano o *n*-heptano, y solubles en tolueno.

Los asfaltenos representan un gran cantidad de problemas en un campo petrolero, y a pesar de que son los componentes significativos de los petróleos pesados, la precipitación de asfaltenos es más común en petróleos más livianos, generando



obstrucción en los pozos, líneas de flujo, instalaciones superficiales y formaciones del subsuelo.

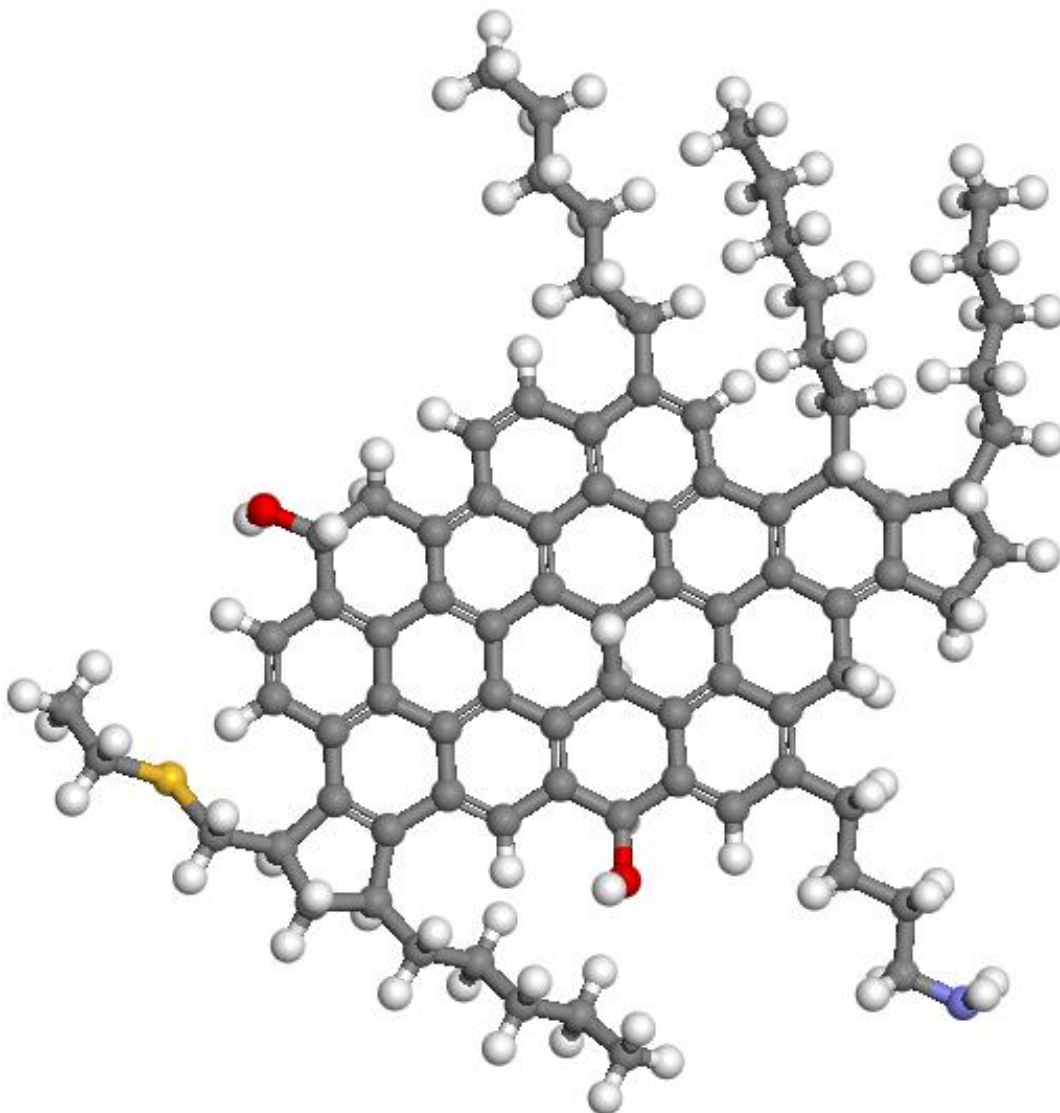
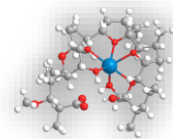


Figura 103. Estructura esquemática de un Asfalteno

8.5 Métodos para realizar el análisis SARA

El análisis de los compuestos saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos (SARA) es aplicable para una amplia variedad de aceites y bitúmenes, lutitas y residuos de



petróleo. Este es un procedimiento de fraccionamiento sencillo que se puede realizar en el laboratorio.

El método consiste en la separación de los componentes de los crudos mediante precipitación con hidrocarburos saturados de bajo peso molecular. La fracción insoluble recibe el nombre de asfaltenos y la soluble de máltenos.

Las técnicas de fraccionamiento SARA se han estandarizado y sirven como guía para realizar la separación de los componentes de un crudo, dichas normas son: ASTM D2006, ASTM D2007-93 y ASTM D4121.

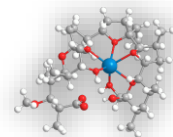
Para determinar la composición de los saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos existen diferentes métodos, algunos de ellos tienen como principio seguir el procedimiento establecido en los estándares antes mencionados, los procedimientos son los siguientes:

- Cromatografía de capa fina con detección de ionización (TLC-FID, por sus siglas en inglés)
- Cromatografía líquida de alta presión (HPLC, por sus siglas en inglés)
- Cromatografía por exclusión de tamaño (SEC, por sus siglas en inglés)

8.5.1 Cromatografía de capa fina con detección de ionización (TLC-FID)

Este tipo de cromatografía se basa en el principio de adsorción y en la interacción entre una fase estacionaria y la muestra. Se utilizan varillas de cuarzo cubiertas con una capa delgada de sílice.

Se expone la muestra a un solvente, por ejemplo hexano y tolueno de alto rendimiento, diclorometano y metanol, la muestra produce iones y electrones al ser puesta en contacto con una llama de hidrógeno y se aplica una diferencia de potencial entre el



extremo del quemador y un electrodo colector, produciendo así una intensidad de corriente proporcional a la cantidad de cada sustancia.

La primera señal detectada en el cromatograma corresponde a los saturados, la segunda a los aromáticos y la tercera a los polares.

8.5.2 Cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC, por sus siglas en inglés)

Es un proceso que se lleva a cabo utilizando presiones muy elevadas. El método inicia removiendo los asfáltenos por precipitación con *n*-hexano, para posteriormente diluir el aceite restante en dicho solvente e inyectar al sistema a través de una válvula de inyección.

Posteriormente se detecta la fracción de saturados por medio del detector RI (índices de refracción) ya que los saturados eluyen primero y no son retenidos por el material de la columna HPLC. A esta fracción le siguen los aromáticos, los cuales son reconocidos en los detectores UV y RI.

Las resinas deben ser eluidas con una fase móvil más polar, mediante un flujo inverso y utilizando diclorometano (DCM, por sus siglas en inglés) como fase móvil.

8.5.3 Cromatografía por Exclusión de Tamaño (SEC)

La cromatografía de exclusión es un método de adsorción que se encuentra ampliamente descrito en la norma ASTM D2007-93 y que consiste en la precipitación de asfáltenos por la acción de *n*-alcanos (pentano o heptano), por lo que se realiza una separación de máltenos (SAR) mediante una columna mixta de sílice seguida de alúmina (**Figura 104**).

La elución de los hidrocarburos se realiza con *n*-heptano y tolueno, la de los aromáticos con una mezcla de 2:1 en volumen de *n*-heptano y tolueno, mientras que las resinas son una mezcla de 1:1:1 de DCM, tolueno y metanol (Figura 104).

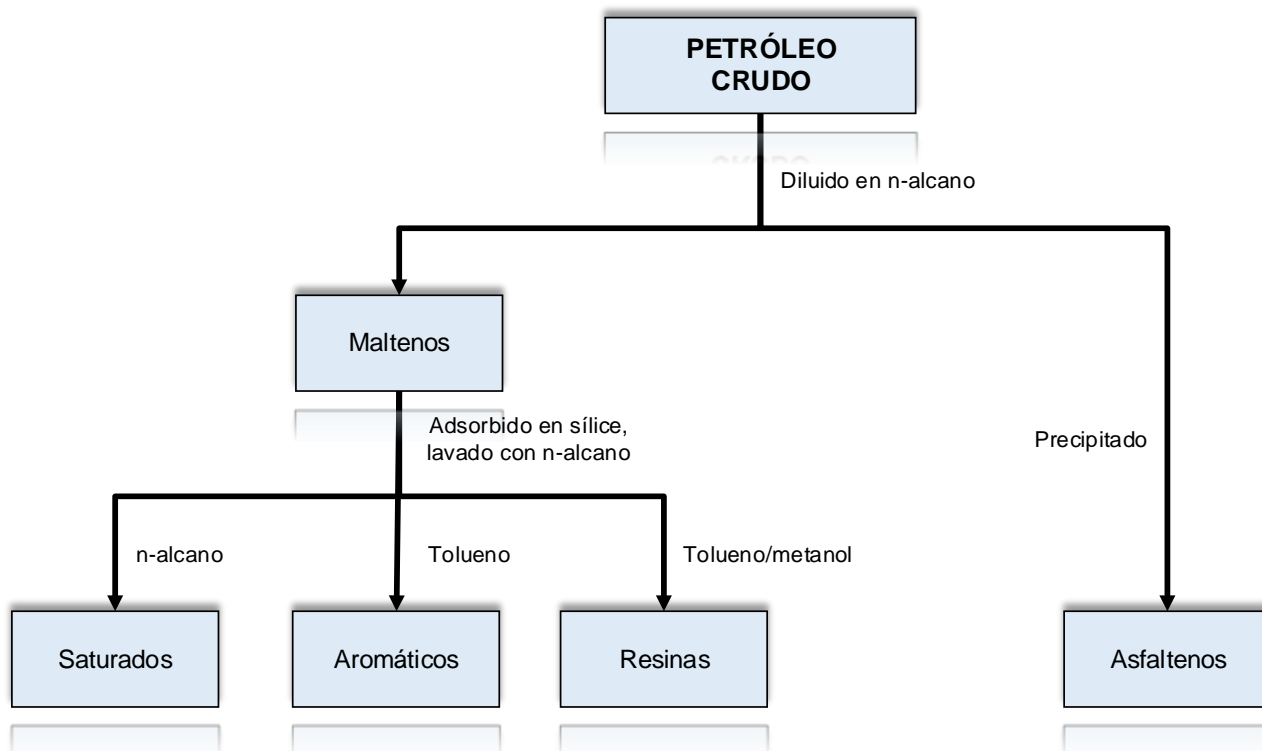
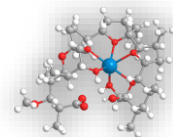


Figura 104. Procedimiento de fraccionamiento SARA de acuerdo a la norma ASTM D2007-93

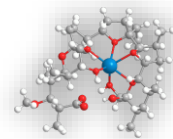
8.6 Ejercicios

1. ¿Para qué sirve el fraccionamiento SARA?

Para conocer las cantidades de cuatro tipos de compuestos (Saturados, Aromáticos, Resinas y Asfaltenos) que se presentan en el petróleo y poder realizar una adecuada caracterización y futura refinación del mismo.

2. ¿En qué se basa el fraccionamiento SARA?

En la diferencia de solubilidad, polaridad y peso molecular de los compuestos del petróleo.



3. ¿En cuántas y cuales fracciones se puede dividir el petróleo?

Se puede dividir en dos fases, la fase líquida la cual consiste en hidrocarburos saturados, aromáticos y resinas, y la fase sólida insoluble en el petróleo y que se encuentra dispersa en forma coloidal compuesta por asfaltenos.

4. ¿Por qué el fraccionamiento SARA es un método muy usado si solo analiza 4 componentes?

Porque analiza la muestra entera, desde compuestos livianos hasta pesados y permite comparar todos los crudos en base a un estándar consistente.

5. ¿Qué compuestos son insolubles únicamente en hidrocarburos aromáticos?

Saturados

Asfaltenos

Resinas

6. ¿Qué indica la disminución de la densidad API?

El incremento de resinas y asfaltenos.

7. ¿Qué tipo de cromatografía utiliza presiones muy altas?

HPLC

SEC

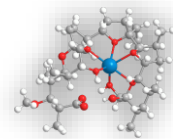
TLC-FID

8. En la cromatografía de capa fina ¿Qué fracción es detectada primero en el cromatograma?

Aromáticos

Saturados

Asfaltenos

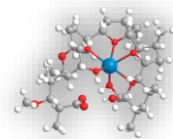


9. ¿En qué se basa la cromatografía de capa fina?

En el principio de adsorción, en el cual los gases, líquidos o sólidos son atrapados o retenidos en una superficie; también se basa en la interacción entre una fase estacionaria y la muestra.

10. ¿Qué tipo de cromatografía se describe en la norma ASTM D2007-93?

Cromatografía por exclusión de tamaño (SEC)



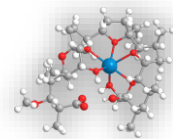
9. ANÁLISIS DEL PETRÓLEO POR CROMATOGRAFÍA DE GASES

La cromatografía de gases es una de las técnicas analíticas más usadas y eficientes de separación de mezclas complejas que se aplican rutinariamente. En la industria petrolera, el proceso de cromatografía de gases es crucial para analizar los muy diversos componentes de distintos hidrocarburos y así poder caracterizar una mezcla de diversa. Esta técnica se basa en el principio de velocidad diferencial a la que viaja dicha mezcla gaseosa por un medio con determinada capacidad de retención para compuestos individuales. La capacidad de tener una velocidad de migración diferencial de cada uno de los componentes de la mezcla es el resultado de la selectividad del sistema cromatográfico.

Para el caso específico de los compuestos de un petróleo crudo, incluyendo a los biomarcadores, la cromatografía de gases monodimensional (GC) y la cromatografía de gases bidimensional (GC×GC), con ayuda de la espectrometría de masas (MS), constituyen una poderosa y sensible herramienta de detección, logrando bajo condiciones analíticas adecuadas muy excelente resolución.

Aunque es rutinario el uso de sistemas GC simples, la cromatografía de gases acoplada (GC x GC) es más recurrida dada su mejor resolución al utilizar 2 columnas cromatográficas ortogonales con fases estacionarias distintas, por ejemplo, una columna apolar y otra polar o viceversa.

El flujo de la primera columna fracciona la mezcla en múltiples segmentos, que se transfieren consecutivamente a la segunda columna selectiva (cromatografía rápida), que está conectada a un detector con alta velocidad de respuesta. Dependiendo de los objetivos requeridos tanto el sistema simple como el doble se pueden acoplar a un espectrómetro de masas con analizador de tiempo de vuelo (MS-TOF).



9.1 Clasificación de métodos cromatográficos

En la caracterización de hidrocarburos se pueden realizar análisis cromatográfico a través de los distintos métodos. En la **Tabla 12** se muestran los sistemas cromatográficos más comunes para separar, detectar e identificar los componentes de una mezcla de acuerdo a su fraccionamiento químico, es decir enfocada solamente a ciertos grupos de interés separados de una matriz específica.

El análisis cromatográfico de las fracciones saturada o aromática aisladas del petróleo o de roca, sedimento o esquisto, se lleva a cabo por cromatografía de gases con detector de ionización en llama (FID) o con detector de masas (MSD), éste último es el método más utilizado.

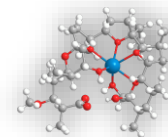
De igual forma, aunque con menos frecuencia, se puede llegar a utilizar un detector de quimioluminiscencia o de conductividad térmica (TCD), que sirve para detectar compuestos heteroatómicos (moléculas orgánicas con nitrógeno, oxígeno o azufre).

Otra forma de analizar la fracción aromática es por cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) y utilizando detectores menos convencionales pero más específicos, como el detector de fluorescencia (FLD).

Normalmente, las columnas cromatográficas capilares utilizadas para analizar y caracterizar el petróleo y sus biomarcadores, son de fase apolar (polidimetilsiloxanos, fenilpolimetilsiloxanos), pero al aumentar los campos de aplicación y la diversidad de biomarcadores de interés, en consecuencia aumenta también número de situaciones en las que se requiere el uso de columnas de fase polar.

El análisis por GC-FID permite comparar de forma sencilla los perfiles cromatográficos, tanto cualitativa como cuantitativamente, siempre y cuando se cuente con sustancias que sirvan como patrón de referencia para identificar los compuestos de interés.

La fracción polar también puede ser analizada por cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) con sistemas de detección UV, DAD, FLD, ELSD o bien, por



espectrometría de masas (LC-MS) ya sea con ionización de moléculas por electronebulización a (ESI); ionización química (APCI), o fotoionización (APPI); estos últimos tres métodos a condiciones de presión atmosférica.

Tabla 12. Clasificación de métodos cromatográficos utilizados para el análisis de petróleo y sus biomarcadores.

Fracciones Saturada y Aromática				Fracción Aromática	Fracción Polar
Cromatografía de Gases				Cromatografía líquida (de alta eficiencia)	
GC-FID GC-TDC Quimioluminiscencia	GC-MS(Q) GC-MS-SIM	GC-MS/MS triple cuadrupolo (QqQ) MRM	GCxGC-MS-TOF GC-HRMS	HPLC (UV, DAD, ELSD) LC-MS	

9.2 Análisis cualitativo

Cada componente de una muestra gaseosa nos proporciona, además del correspondiente tiempo de retención para compuestos individuales, tres datos adicionales: posición, alto y ancho de los picos que conforman un cromatograma. La posición, cuantitativamente expresado como dato de retención, otorga la información cualitativa y los otros dos (altura y anchura), nos brindan información cuantitativa.

En condiciones favorables, es decir, cuando se tiene buena resolución y los picos se pueden apreciar claramente de forma separada, es posible identificar los componentes tan solo por la posición de los mismos respecto a estándares internos de laboratorio, pero por lo general se tendrá que recurrir también a la información con la obtenida por otros métodos analíticos, preferiblemente por técnicas multiparamétricas, como la espectrometría de masas o de infrarrojo (IR).

No existe un método general aplicable a todos los problemas prácticos, la información cromatográfica cualitativa dependerá del conocimiento previo de la composición de las muestras. En la **Figura 105** se resumen los procedimientos utilizados para identificar los picos para sistemas cromatográficos convencionales.

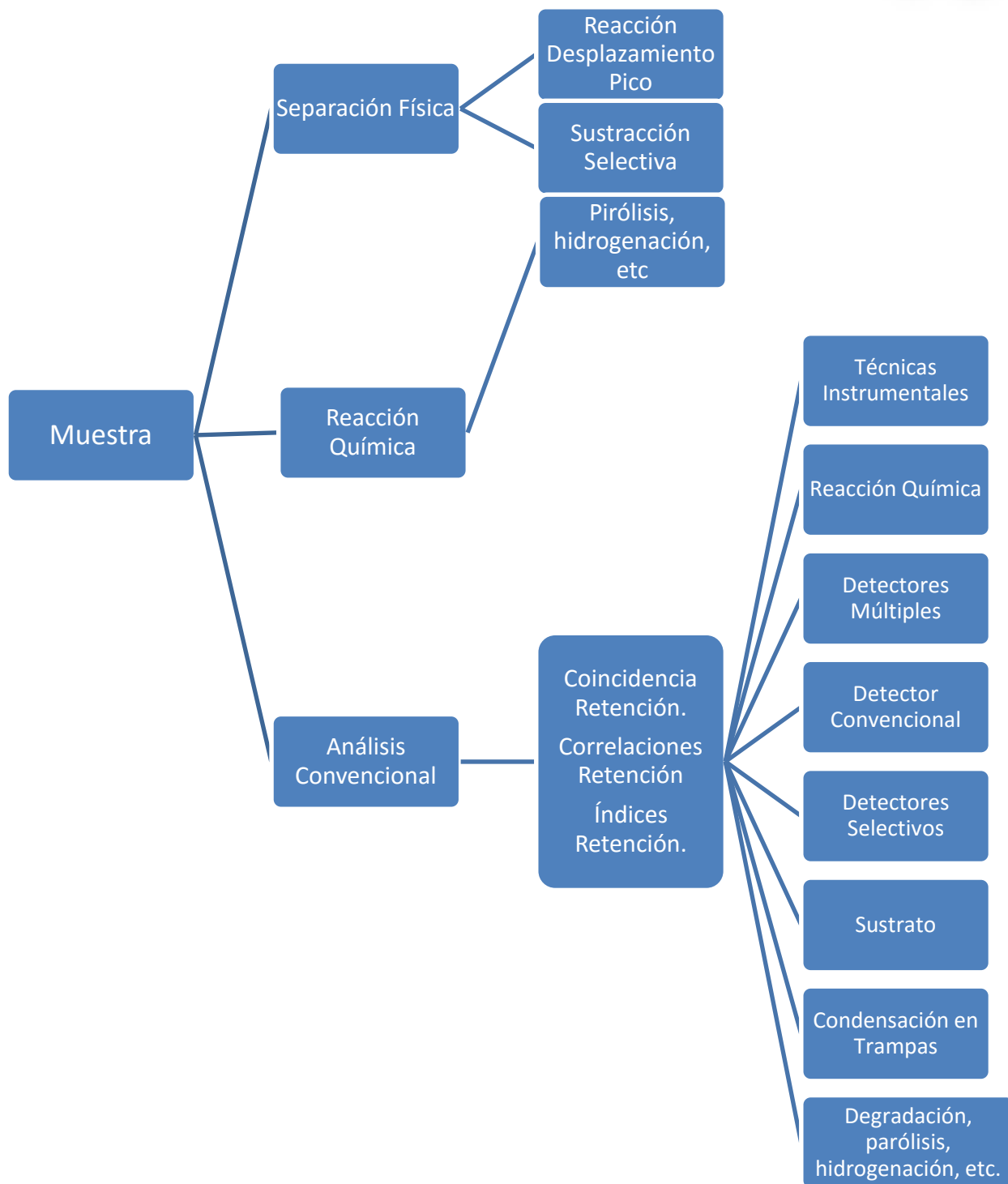
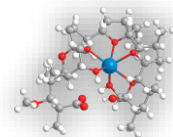
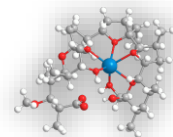


Figura 105. Identificación cualitativa por cromatografía de gases.



9.3 Ejemplos de Cromatografía para Crudos Mexicanos

En la **Figura 106** se presenta una selección de cromatogramas de iones totales al momento (TIC, por sus siglas en inglés) de algunos crudos mexicanos seleccionados.

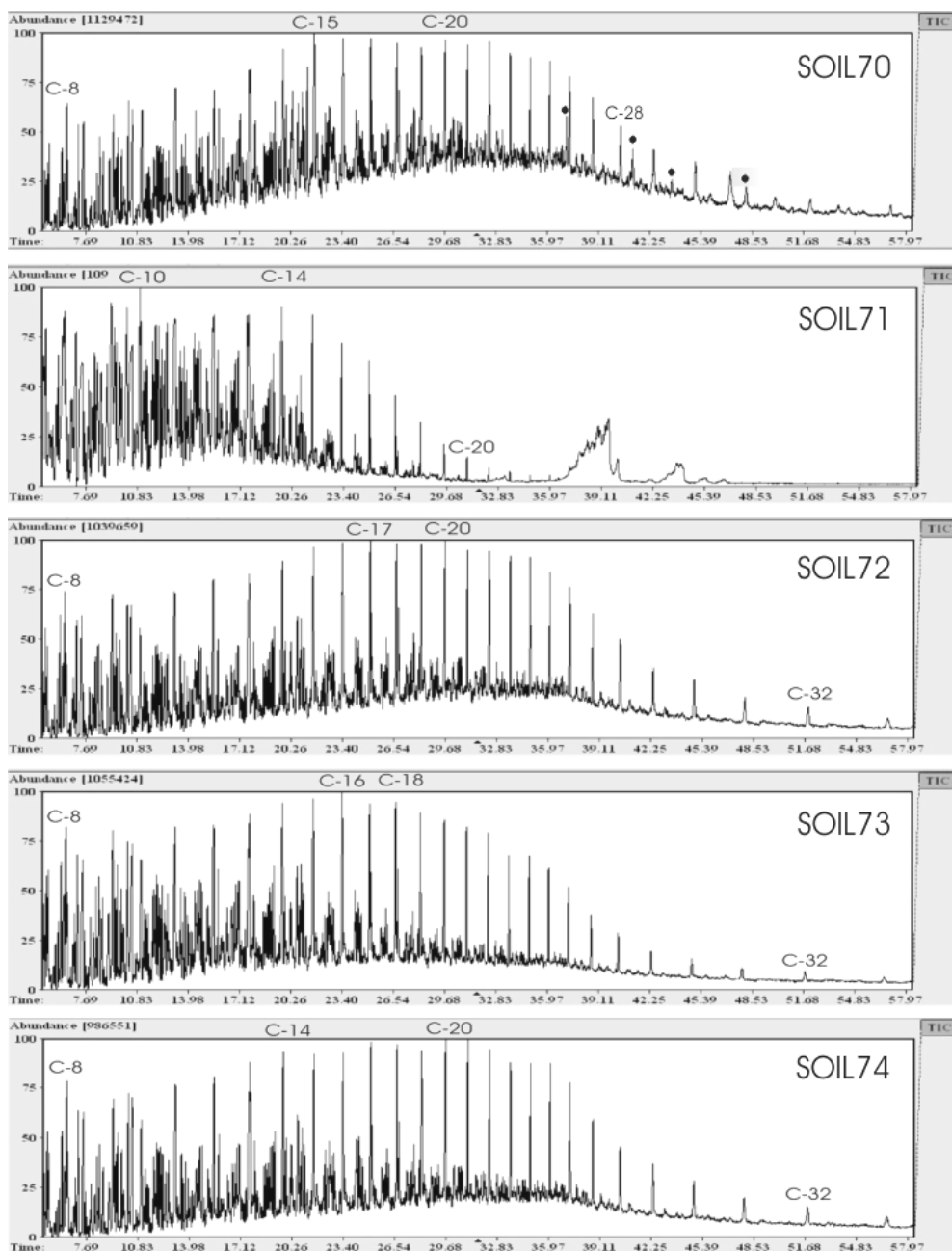
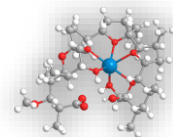


Figura 106. Cromatografía crudos mexicanos selectos.



La característica principal de los aceites mexicanos es la gran cantidad de hidrocarburos coexistentes en un rango molecular bajo ($<n\text{-C}_{12}$).

Los biomarcadores pristano y fitano se presentan en bajas a medianas concentraciones, siendo casi la mitad o menor cantidad que los alcanos $n\text{-C}_{17}$ y $n\text{-C}_{18}$ ($n\text{-C}_{17} \gg \text{C}_{19}\text{-Pr}$ y $n\text{-C}_{18} \gg \text{C}_{20}\text{-Ph}$), a excepción de la muestra 72 en la que el pristano es mayor que $n\text{-C}_{17}$, $n\text{-C}_{18}$ y fitano, además, entre las muestras 70 y 71 se pueden distinguir dos marcos de distribución composicional.

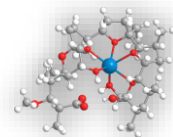
Los resultados para la GC-MS del ejemplo muestran a la serie homóloga de n -alcanos como la principal fracción resuelta, aunque en el rango $n\text{-C}_8$ a $n\text{-C}_{11}$ aparecen numerosos compuestos de menor punto de ebullición.

9.4 Análisis cuantitativo

Normalmente, no se pueden identificar todos y cada uno de los componentes que conforman los fluidos de un yacimiento mediante los métodos químicos de separación existentes. Tampoco otros datos de interés como las propiedades críticas de componentes pesados similares al C_{20} o mayores, pueden ser determinados con exactitud por medio de estas técnicas.

Este problema puede ser resuelto con ayuda de métodos experimentales y matemáticos, mediante una caracterización aproximada de los compuestos más pesados.

La caracterización de las fracciones de heptano plus C_{7+} requiere de varios pasos, el primero consiste en dividir al C_{7+} en cierto número de fracciones con composición molar conocida. Posteriormente, se define el peso molecular, la gravedad específica y el punto de ebullición de cada fracción; y por último se estiman las propiedades críticas y el factor acéntrico para cada fracción de C_{7+} .



9.4.1 Análisis experimental

La fuente más confiable para caracterizar al C_{7+} son los datos experimentales obtenidos de la destilación por cromatografía de gases a alta temperatura. La técnica del Punto de Ebullición Real (TBP por sus siglas en inglés) provee los datos necesarios para completar esta caracterización, incluyendo cantidades molares y de masa, así como datos clave para cada fracción (gravedad específica, el peso molecular y punto de ebullición), los cuales no pueden ser obtenidos por GC.

La cromatografía de gases (GC), constituye una alternativa más rápida y menos costosa que la destilación TBP, sin embargo el análisis por GC sirve únicamente para cuantificar la masa de la cantidad de fracciones de carbono del C_{7+} .

Por ello es recomendable realizar al menos un análisis TBP completo para los siguientes casos:

- a) Yacimientos que pudieran ser candidatos a inyección de gas.
- b) La mayoría de los yacimientos de gas y condensado.

La aplicación más importante de la cromatografía en la caracterización del C_{7+} es la destilación simulada por técnicas de GC.

La **Figura 107** muestra el cromatograma de una muestra del Mar del Norte, cuyos picos dominantes representan parafinas normales, las cuales pueden identificarse hasta C_{22} . El hexano normal fue utilizado como patrón interno para la muestra.

En la **Figura 108** se observan las curvas de destilación obtenidas mediante TBP vs. la simulada por GC para la misma muestra, se utilizó un factor de corrección al patrón interno del 15% para hacer coincidir ambas curvas.

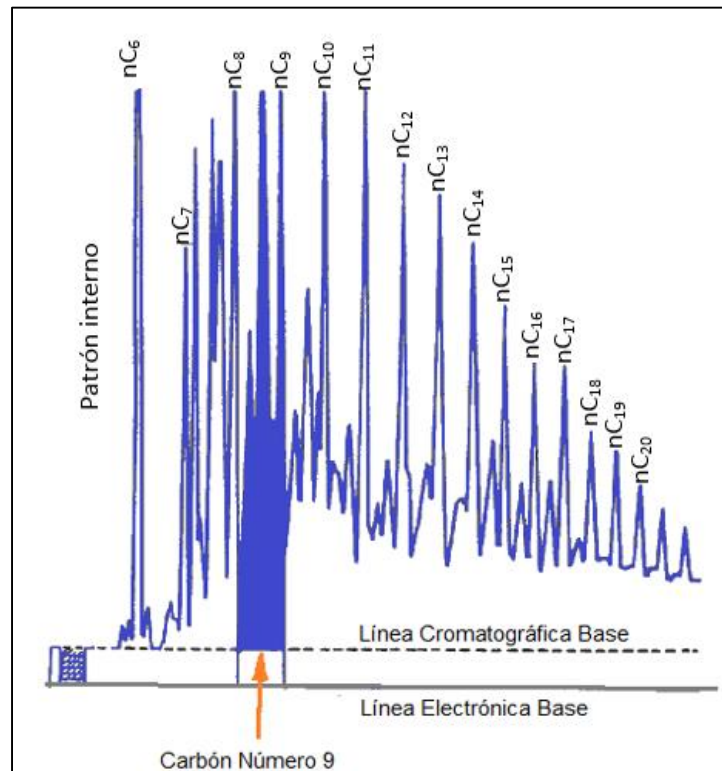
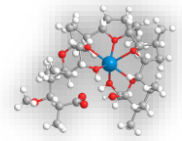


Figura 107. Destilación Simulada por GC de una muestra de gas y condensado del Mar Norte.

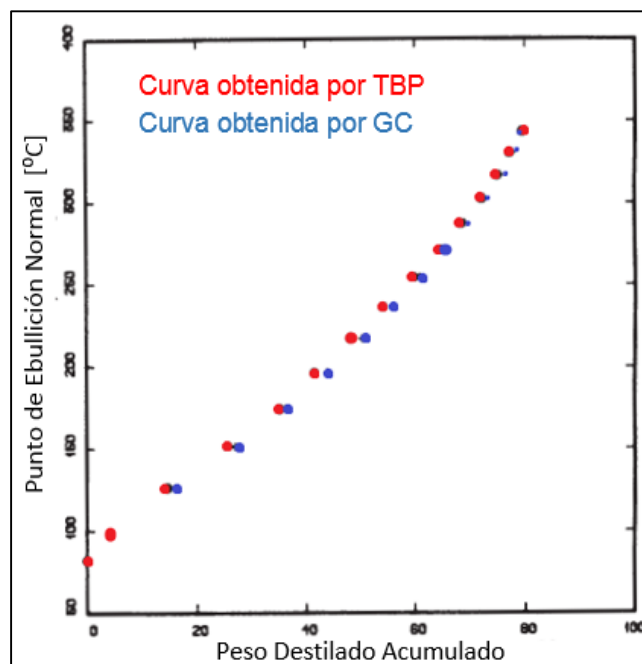
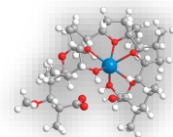


Figura 108. Comparación entre curvas de Destilación por TBP y Simulación por GC



9.4.1 Distribución Molar

La mayoría de los métodos para dividir al C₇₊ en un número arbitrario de fracciones, asumen que la fracción molar disminuye de forma exponencial en función del peso molecular o el número de carbonos. Así mismo, un modelo más general basado en la distribución gamma, ha sido aplicado exitosamente a varios sistemas de aceite y gas y condensados.

La distribución molar se entiende comúnmente como la relación entre la fracción mol y el peso molecular, pero esta relación existe únicamente si las fracciones son separadas consistentemente. Por lo tanto, estrictamente, la distribución molar es la relación entre la cantidad molar (fracción mol) acumulada y una expresión para el peso molecular acumulado.

La siguiente expresión representa la fracción mol acumulada:

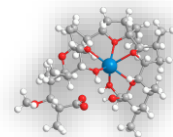
$$Q_{zi} = \frac{\sum_{j=1}^i Z_j}{\sum_{j=1}^N Z_j} \dots \dots \dots \text{Ecuación (1)}$$

Y para el peso molecular promedio acumulado:

$$Q_{Mi} = \frac{\sum_{j=1}^i Z_j M_j}{\sum_{j=1}^i Z_j} \dots \dots \dots \text{Ecuación (2)}$$

Una gráfica de la Ec. 1 vs. la Ec. 2 generan una sola curva para una muestra C₇₊ destilada a volúmenes de corte constantes.

Algunos métodos utilizan la separación consistente de las fracciones para que la distribución molar pueda ser expresada directamente como una relación entre la fracción mol y el peso molecular de cada corte de forma individual.



La correlación de viscosidad de Lohrenz-Bay-Clark (LBC) es uno de los intentos más recientes de utilizar la distribución de tipo exponencial para separar las fracciones de C_{7+} , dividiéndolo en parafinas normales desde C_7 hasta C_{40} mediante la siguiente relación:

$$z_i = z_{C_6} \exp[A_1(i-6)+A_2(i-6)^2] \dots \dots \dots \text{Ecuación (3)}$$

Donde:

i = número de carbonos
 z_{C_6} = fracción mol C_6 medida.

A_1 y A_2 se determinan por prueba y error para cumplir con:

$$z_{C_{7+}} = \sum_{i=7}^{40} Z_i \dots \dots \dots \text{Ecuación (4)}$$

$$z_{C_{7+}} M_{C_{7+}} = \sum_{i=7}^{40} Z_i M_i \dots \dots \dots \text{Ecuación (5)}$$

Siendo el peso molecular de las parafinas determinado por:

$$M_i = (14_i + 2)$$

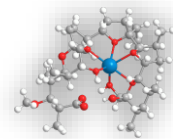
El sistema de ecuaciones para la Ec. 4 y Ec. 5 puede ser resuelto por Newton-Raphson; cabe señalar que ésta correlación (LBC) no puede ser utilizada cuando $z_{C_{7+}} < z_{C_6}$ y $M_{C_{7+}} > M_{C_{40}}$.

Otra manera más común de aplicar el método exponencial para dividir la fracción C_{7+} es en su forma lineal, escribiendo la distribución exponencial de forma general, para cualquier C_{n+} (siendo $n=7$ un caso especial); como se expresa a continuación:

$$z_i = z_{C_n} \exp^{A[(i-n)]} \dots \dots \dots \text{Ecuación (6)}$$

Donde:

z_i = número de carbonos



z_{C_n} = fracción mol de C_n

A = constante que indica la pendiente de la recta dada por $\ln z_i$ vs. i .

Las constantes z_{C_n} y A pueden determinarse explícitamente con la expresión:

$$M_i = 14i + h \dots \dots \dots \text{Ecuación (7)}$$

9.5 Ejercicios

1. Es una de las técnicas analíticas de separación de mezclas complejas más utilizadas y eficientes que se aplican rutinariamente:

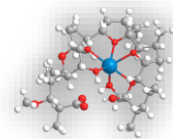
- Espectrometría de Masas (MS)
- Cromatografía de Gases (GC)
- Cromatografía de Gases y Espectrometría de Masas (GC-MS)

2. Constituyen una poderosa y sensible herramienta de detección para el caso específico de un petróleo crudo, incluyendo a los biomarcadores:

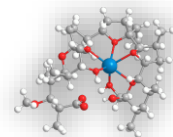
- Cromatografía de Gases y Espectrometría de Masas (GC-MS)
- Cromatografía de Gases Monodimensional y Bidimensional (GCxGC)
- Cromatografía de Gases Monodimensional y Bidimensional (GCxGC) con Espectrometría de Masas (MS)

3. Se lleva a cabo por Cromatografía de Gases con detector de Ionización en Llama (FID) o con detector de masas (MSD):

- Análisis cromatográfico de las fracciones saturada o aromática del petróleo



- Análisis cromatográfico de las fracciones insaturadas del petróleo.
 - Análisis cromatográfico de las fracciones polar o aromática del petróleo.
4. Sirve para detectar compuestos heteroatómicos, es decir, moléculas orgánicas con contenido de nitrógeno, oxígeno o azufre:
- Detector de masas (MSD)
 - Detector de Fluorescencia (FLD)
 - Detector de quimioluminiscencia o de conductividad térmica (TCD)
5. Otra forma de analizar la fracción aromática es por Cromatografía Líquida de Alta Eficiencia (HPLC), utilizando detectores menos convencionales y más específicos como el:
- Detector de masas (MSD).
 - Detector de Fluorescencia (FLD).
 - Detector de quimioluminiscencia o de conductividad térmica (TCD).
6. Permite comparar de forma sencilla los perfiles cromatográficos, siempre y cuando se cuente con sustancias que sirvan como patrón de referencia para identificar los compuestos de interés:
- Análisis por Cromatografía de Gases con detector de ionización en llama (GC-FID)
 - Análisis por Cromatografía de Gases con detector de masas (GC-MSD)
 - Análisis por Cromatografía de Gases con detector de quimioluminiscencia (GC-TCD).
7. Puede ser analizada, de igual forma, por cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) con sistemas de detección UV, DAD, FLD, ELSD o bien, por espectrometría de masas (LC-MS):



- La fracción saturada
- La fracción saturada y aromática
- La fracción polar

8. Cada componente de una muestra gaseosa nos proporciona, además del correspondiente tiempo de retención para compuestos individuales, tres datos adicionales:

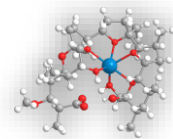
- Posición, altura y frecuencia de los picos que conforman un cromatograma.
- Posición, altura y ancho de los picos que conforman un cromatograma.
- Posición, frecuencia ancho de los picos que conforman un cromatograma.

9. Dato que otorga la información cualitativa en un cromatograma, expresada cuantitativamente como dato de retención:

- La posición de los picos.
- La posición de los picos.
- La anchura de los picos.

10. Datos que brindan la información cuantitativa en un cromatograma

- La posición y altura de los picos.
- La posición y anchura de los picos.
- La altura y anchura de los picos.



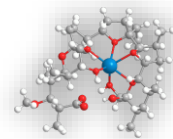
10. BIOMARCADORES

El petróleo es, en última instancia, el producto de la descomposición termogénica de materia orgánica que fue acumulada en el pasado geológico. Dependiendo del origen de esta materia orgánica (terrestre, marina, mezcla de ambas, lacustre,...) y después de haber sido acumulada en unidades litológicas específicas (Roca Generadora) y sometida a distintos procesos de sepultamiento, posterior maduración térmica y finalmente de migración, los productos finales se acumularon en sitios específicos (Roca Almacén), impidiéndose su pérdida al ser protegida por una trampa (Roca Sello) que favoreció su conservación, dando lugar en consecuencia a un yacimiento petrolero.

Así, la química del petróleo está asociado inherentemente a la materia de la que proviene. Esta herencia orgánica está reflejada en cada uno de los constituyentes del petróleo y se conocen como biomarcadores.

Se conoce como biomarcadores a aquellos compuestos que pueden ligarse de forma directa con sus precursores biológicos y cuyo esqueleto (base de carbonos e hidrógenos) se preserva de tal forma que es reconocible a pesar de haber estado sometida a diagénesis y gran parte de la catagénesis.

Muchos biomarcadores tienen inicialmente grupos funcionales que contienen oxígeno (dado que algunos de ellos son derivados de los lípidos de los organismos originales) y se ven sometidos al mismo proceso de pérdida de grupos funcionales que el resto de la materia orgánica. Por lo tanto, los productos diagenéticos son generalmente hidrocarburos, aunque la mayoría pueden sobrevivir a la etapa diagenética, particularmente pequeñas cantidades de compuestos con grupos funcionales, como los ácidos grasos.



10.1 Biomarcadores Petroleros (Geomarcadores)

Debido a la variedad de condiciones geológicas y edades bajo las cuales se forma el petróleo, cada tipo de crudo exhibe una huella “biomarcadora” (proto-biogénica) única que lo identifica. La composición del petróleo crudo varía ampliamente dependiendo de la fuente o roca generadora del aceite, del régimen térmico que predominó durante su formación, de la migración geológica y las condiciones del yacimiento. Es por esta razón que los petróleos crudos pueden presentar grandes diferencias en cuanto a:

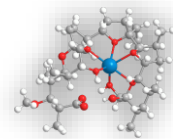
- ✓ La distribución de patrones de *n*-alcanos, iso-alcanos y ciclo-alcanos, así como los perfiles de la mezcla compleja resolución (UCM, por sus siglas en inglés).
- ✓ Las relaciones o cocientes relativos de isoprenoides, hidrocarburos normales homólogos y PAHs.

La mayoría de estos componentes son sometidos, con el tiempo, a cambios en su estructura química, como resultado de distintos factores dentro de los cuales está la biodegradación y metagénesis.

Respecto a otros grupos de hidrocarburos en el aceite, existen compuestos biomarcadores distintivos que son más resistentes a la degradación en el ambiente, como por ejemplo: pristano, fitano, estereanos, triterpenos y porfirinas. Estos compuestos no degradables se conocen como en el estudio de sistemas petroleros como biomarcadores o “fingerprints”.

10.2 Análisis de Biomarcadores

La disponibilidad de las técnicas de Cromatografía de Gases y Espectrometría de Masas (CG-MS), así como de sistemas analíticos e incremento de bases de datos asociados desarrollados desde mediados de los 1970's, conllevó al uso de biomarcadores para una gran variedad de propósitos, particularmente en el ámbito de la exploración petrolera.



La compleja estructura de los biomarcadores y su posible presencia en bajas concentraciones provocó la necesidad de análisis más sensibles y precisos. El desarrollo de métodos analíticos y la combinación de los mismos, son de muy importantes para poder separar, monitorear y detectar las concentraciones absolutas y la estructura de los biomarcadores petroleros (geomarcadores).

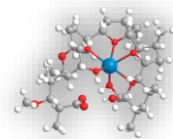
El uso de técnicas híbridas, (las cuales surgen de combinación de distintas técnicas), aumenta el poder analítico de los métodos empleados. CG-MS puede ser considerada como el método más utilizado en la caracterización de los grandes grupos de biomarcadores. La cromatografía de gases provee la facilidad de poder separar las diferentes estructuras de biomarcadores, mientras que la espectroscopia de masas ayuda a detectar con precisión e identificar dichas estructuras.

Las estructuras de carbono de los biomarcadores se deben a las moléculas antecesoras de ciertas sustancias biológicas, puesto que existen algunos tan pequeños que solo son visibles a nivel molecular y únicamente son detectados mediante espectrometría de masas.

A continuación, se explicará brevemente cómo se llevan a cabo dichos métodos por separado y en qué consisten.

10.2.1 Separación mediante técnicas cromatográficas

La cromatografía es la separación de una mezcla de compuestos en sus componentes individuales, de acuerdo a su volatilidad. Existen numerosas técnicas cromatográficas, pero la cromatografía de gases (GC) es la más importante para el estudio de biomarcadores, ya que posee un gran número de ventajas respecto a otras técnicas de fraccionamiento; la principal de ellas es su capacidad de identificar (cualitativamente) y medir (cuantitativamente) la cantidad de cada uno de los varios componentes de la muestra.



El proceso consiste en introducir los compuestos de la mezcla en una columna capilar en un equipo de cromatografía gaseosa para después separar cada compuesto y detectarlo al pasar por un detector con ionización de flama (FID, por sus siglas en inglés), donde cada compuesto es ionizado con ayuda de un filamento de metal. En caso de estar acoplado a un sistema de MS, los iones son filtrados por un analizador cuadrupolar con base en la relación carga/masa y un multiplicador de electrones que cuantifica los iones de la masa seleccionada (**Figura 109**).

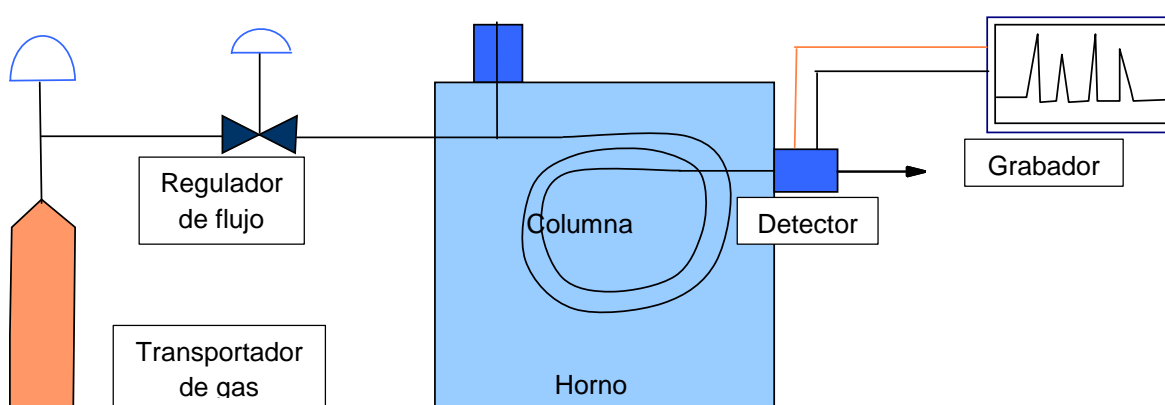
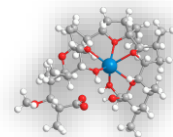


Figura 109. Sistema Cromatográfico de Gases.

10.2.2 Identificación por técnicas espectroscópicas

Existen diferentes tipos de detectores que pueden ser empleados dependiendo de los compuestos a analizar. La Espectrometría de Masas (MS) se utiliza comúnmente en laboratorios analíticos que estudian una gran variedad de compuestos y proveen una herramienta satisfactoria para obtener huellas específicas para clases y series homólogas de compuestos resueltos por cromatografía de gases. Esta técnica tiene usos tanto cualitativos como cuantitativos, incluyendo identificación y determinación de la estructura de un compuesto mediante la observación de sus fragmentos ionizados.

El espectrómetro de masas ha sido reconocido por mucho tiempo como el detector más poderoso para cromatografía de gases. Típicamente el instrumento consiste de 3 módulos; una fuente iónica: la cual puede convertir el constituyente separado en iones,



un analizador de masa: el cual separa iones por sus masas aplicando campos electromagnéticos, y un detector: el cual calcula la abundancia de cada ion presente mediante un método cuantitativo para generar señales. El tamaño de las señales corresponde a la cantidad de compuesto presente en la muestra.

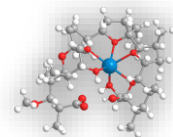
La caracterización de algunos de los grandes grupos de biomarcadores se logra usando los siguientes fragmentos iónicos en el espectrómetro de masas:

- Alquil-ciclohexanos: m/z 83
- Metil-alkil-ciclohexanos: m/z 97
- Isoalcanos e isoprenoides: m/z 113, 127, 183
- Sesquiterpanos: m/z 123
- Adamantanos: m/z 135, 136, 149, 163, 177 y 191
- Diamantanos: m/z 187, 188, 201, 215 y 299
- Tri-, tetra-, penta-ciclo terpanos: m/z 191
- 25-norhofanos: m/z 177
- 28,30 bisnorhoptanos: m/z 163, 191
- Esteranos: m/z 217, 218
- 5α (H)-esteranos: m/z 149, 217, 218
- 5β (H)-esteranos: m/z 151, 217, 218
- X diasteranos: m/z 217, 218, 259
- Metil.esteranos: m/z 217, 218, 231, 232
- Esteranos monoaromáticos: m/z 253
- Esteranos triaromáticos: m/z 231

El fragmento m/z 191 es comúnmente el pico base del espectro de masa de los biomarcadores petroleros.

10.3. Rangos de diagnóstico de biomarcadores

Los parámetros para diagnosticar biomarcadores han sido establecidos y son ampliamente utilizados para correlaciones de aceite, determinación de aporte orgánico,



ambientes de depósito, estimación de madurez térmica y evaluación de la biodegradación de aceite in-situ.

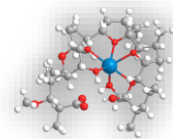
Los rangos de diagnóstico (RDs) pueden ser calculados cuantitativamente (a partir de concentraciones de compuestos), o semi-cuantitativamente (a partir de datos como áreas de picos y alturas). La mayoría de los biomarcadores en pruebas de derrame y aceites, en particular aquellas series homólogas de biomarcadores con estructuras similares, muestran muy pocos o ningún cambio en sus respectivos RDs. Por lo tanto, la comparación entre radios de diagnóstico refleja más directamente las diferencias de distribución de biomarcadores entre muestras.

10.4. Parámetros utilizados en la identificación de huellas moleculares o biomarcadores del petróleo

- ✓ Características de alcanos normales.- La distribución de *n*-alcanos en crudos se puede utilizar para indicar la fuente de materia orgánica.
- ✓ Índice de preferencia al carbono (CPI, por sus siglas en inglés).- Obtenido de la distribución de *n*-alcanos. Es el rango obtenido de dividir la suma de los alcanos con carbonos impares entre la suma de los alcanos cuyos carbonos son pares.
- ✓ Grado de contenido de alcanos.- Se puede expresar como una división entre rangos $\Sigma C_{21}-C_{31} / \Sigma C_{15}-C_{20}$. Generalmente un valor menor a 1 indica baja naturaleza cerosa y sugiere una fuente de origen orgánico marino.

10.5. Importancia del estudio de Biomarcadores en la Industria Petrolera

Su importancia radica en la gran utilidad que tienen para detectar el ambiente de depósito al identificar la acumulación de cierto tipo de organismos, ya que los biomarcadores son un reflejo de la clase de materia orgánica que se encuentra en los sedimentos, así como de los procesos químicos a los que fueron sometidos después de



la sedimentación. Estas combinaciones de moléculas, con sus respectivas reacciones químicas son únicas y varían dependiendo de la cuenca y/o campo, por lo que son indicadores de ubicaciones específicas.

Además del ambiente de depósito, los geoquímicos pueden determinar, por medio de relaciones entre biomarcadores, la madurez de la roca generadora, así como el tipo de litología y la cantidad o el aporte (terrestre vs. marino) de material orgánico. Este tipo de huellas geoquímicas también pueden ser usadas para comparar distintos tipos de crudo, si se compara un petróleo con una muestra de su potencial roca generadora, se puede vincularlo a su fuente, a través de dicha huella.

El empleo de biomarcadores es útil también en el estudio de la evolución de la degradación del petróleo cuando se emplean microorganismos. En función de la resistencia a la degradación, existen biomarcadores que sirven para evaluar mejor la eficacia de la biorremediación en las primeras etapas, como es el caso de los hidrocarburos alifáticos, mientras que otros, como los hidrocarburos aromáticos o los hopanos, permiten determinar la degradación a más largo plazo

10.6. Relación Dibenzotiofeno/Fenantreno y Pristano/Fitano como indicadores de ambiente de depósito y litología de rocas generadoras

Al combinar los índices Dibenzotiofeno/Fenantreno y Pristano/Fitano en una gráfica cruzada se puede determinar fácilmente el ambiente de depósito así como la litología de la posible roca generadora para distintos tipos de crudo, lo cual es de gran ayuda para identificar la roca generadora y da pauta para realizar con mayor certeza exploraciones futuras.

Esta combinación da origen a una clasificación con distintos grupos que integran ambiente de depósito/litología, dentro de los que destacan (**Tabla 13**):

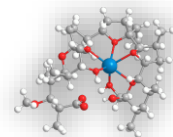


Tabla 13. Ambientes de Depósito de Sistemas Petroleros

Ambiente de Depósito	Litología
Marino	Carbonatos
Marino / Lacustre	Carbonatos / alto contenido de azufre
Lacustre	Bajo contenido de azufre
Marino / Lacustre	Lutitas
Fluvial / Deltáico	Lutitas carboníferas y carbón

Los valores obtenidos de la relación dibenzotiofeno/fenantreno constituyen un indicador confiable de la litología que conforma la roca generadora. Ayudan a evaluar la cantidad de azufre reducido incorporado a la materia orgánica. Los rangos menores a 1 representan generalmente unidades de lutitas y cuando el valor obtenido es mayor a 1 indica presencia de rocas carbonatadas.

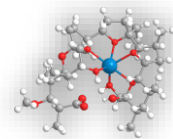
$$\frac{\text{Dibenzotiofeno}}{\text{Fenantreno}} < 1 \rightarrow \text{lutita} \dots \dots \dots \text{Ecuación (8)}$$

$$\frac{\text{Dibenzotiofeno}}{\text{Fenantreno}} > 1 \rightarrow \text{carbonato} \dots \dots \dots \text{Ecuación (9)}$$

En el caso de la relación pristano/fitano, sus valores se pueden asociar a las condiciones de oxidación que presenta el ambiente de depósito.

Parker, (1975) estableció que los valores altos en la relación pristano/fitano con respecto a la unidad (> 1) son un indicador que los hidrocarburos presentes en los sedimentos son de origen biogénico.

Al analizar crudos con concentraciones de fitano similares, se encontró que los de ambiente marino con carbonatos presentan una relación pristano/fitano <1. Los aceites provenientes de lutitas de origen marino oscilan entre 1-3 y los no marinos pueden llegar a alcanzar un valor de 8. Los petróleos de origen lacustre, generalmente presentan las mayores concentraciones de fitano, aunque no necesariamente. Una relación pristano/fitano >3 se deberá más bien a altas concentraciones de pristano.



10.7 Ejercicios

1. ¿Qué son los biomarcadores?

Son aquellos compuestos de materia orgánica que pueden ligarse de forma directa con sus precursores biológicos y cuya base de carbonos e hidrógenos se preserva de tal forma que es reconocible.

2. Menciona algunos biomarcadores distintivos de los grupos de hidrocarburos en el aceite que son más resistentes a la degradación en el ambiente.

Pristano, fitano, estereanos, triterpenos y porfirinas.

3. ¿Cuál es el método más utilizado para caracterizar los grandes grupos de biomarcadores?

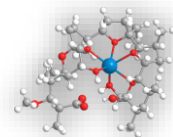
CG-MS (Cromatografía de gases – Espectrometría de masas)

4. ¿En qué consiste la Cromatografía y a qué se debe su importancia en el estudio de biomarcadores?

Es la separación de una mezcla de compuestos en sus componentes individuales, de acuerdo a su volatilidad y su principal ventaja es su capacidad de identificar y medir la cantidad de cada componente de la muestra.

5. ¿Qué datos se pueden obtener mediante Espectrometría de masas?

Huellas específicas para clases y series homólogas de compuestos resueltos por cromatografía de gases, utilizadas para identificar y determinar de la estructura de un compuesto.



6. Comúnmente, ¿Cuál es el pico base del espectro de asa de los biomarcadores petroleros?

El fragmento m/z 191

7. ¿Qué son los rangos de diagnóstico (RD's) y para qué se utilizan?

Son los parámetros empleados para diagnosticar biomarcadores y son ampliamente utilizados para correlaciones de aceite, determinación de aporte orgánico, ambientes de depósito, estimación de madurez térmica y evaluación de la biodegradación de aceite in-situ.

8. ¿Por qué es importante el estudio de biomarcadores en la Industria Petrolera?

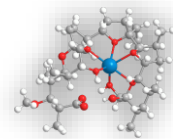
Son de gran utilidad para detectar el ambiente de depósito, también se pueden determinar, por medio de relaciones entre biomarcadores, la madurez de la roca generadora, así como el tipo de litología y la cantidad o el aporte (terrestre vs. marino) de material orgánico.

9. ¿Qué información se puede obtener a partir de la relación Dibenzotiofeno/Fenantreno y Pristano/Fitano?

Al combinar dichos índices en una gráfica cruzada se puede determinar fácilmente el ambiente de depósito, así como la litología de la posible roca generadora para distintos tipos de crudo.

10. ¿Qué significado tiene cuando el valor de la relación Dibenzotiofeno/Fenantreno es menor a 1 y cuando es mayor a 1?

Los rangos menores a 1 representan generalmente unidades de lutitas y cuando el valor obtenido es mayor a 1 indica presencia de rocas carbonatadas.



CONCLUSIONES

La Química es una materia de gran importancia que, a pesar de ser impartida en la Facultad de Ingeniería, no se desarrolla con aplicaciones o casos prácticos que favorezcan aprendizajes significativos y por consiguiente no se fomenta la motivación.

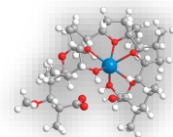
Las ramas de la Química, y en particular la Química Orgánica, como caso de estudio del presente trabajo, son de especial interés en el sector energético y en específico en la industria petrolera debido a que la explotación de los yacimientos implica todo un amplio proceso de extracción de compuestos conformados principalmente por Carbono e Hidrógeno, los cuales son los elementos más representativos de la Química Orgánica.

Las principales familias de hidrocarburos son las de los alcanos, alquenos y alquinos, los cuales se diferencian entre sí por el tipo de enlace que presentan; sencillo para los alcanos, doble para los alquenos y triple para los alquinos.

Además de los hidrocarburos antes mencionados y sus respectivas familias de cadena cerrada (cicloalcanos, cicloalquenos y cicloalquinos), existen los hidrocarburos aromáticos, los cuales son hidrocarburos cíclicos que contienen dobles enlaces (benceno).

Los hidrocarburos también pueden tener algunos sustituyentes unidos a su cadena carbonada, tanto para los hidrocarburos alifáticos, como para los aromáticos; dichos sustituyentes reciben el nombre de grupo funcional, el cuál cambia completamente el nombre del compuesto y sus propiedades.

Conocer la cantidad de componentes en una mezcla, así como la separación de los mismos requiere de diversos análisis, uno de ellos es la cromatografía, la cual consiste en separar gases o líquidos de la mezcla, y para caso del petróleo, se puede realizar un fraccionamiento SARA, el cual separa y cuantifica saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos a través de diferentes técnicas cromatográficas.



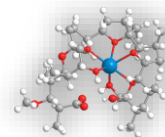
Otro tema importante y ligado a la cromatografía es el de los biomarcadores, los cuales son compuestos que nos ayudan a conocer el ambiente de depósito de la muestra a analizar.

La cantidad de moléculas, la estructura, propiedades físicas y químicas y los diferentes elementos que componen a los hidrocarburos, proporcionan la principal y más importante información para poder conocer la composición en el crudo que se extrae y así poder tener una caracterización más certera de los fluidos que se obtienen de los yacimientos.

Las aplicaciones de la Química Orgánica en las actividades petroleras o que tienen relación indirecta con las mismas (Petroquímica básica y aplicada), son extensas, muchas de ellas requieren de un nivel de conocimiento mayor, además del trabajo necesario en conjunto con otras ramas de la Química y demás ciencias.

El apoyo que se brinda a los estudiantes al disponer de un libro de Química con aplicaciones en Ciencias de la Tierra los hará conocer mejor su carrera y generar interés para propiciar que por su cuenta profundicen e investiguen más allá de un plan de estudios.

A través de material didáctico, creativo y con el grado de complejidad necesaria, se pretende que tanto profesores como alumnos cuenten con una guía que explique a más detalle lo planteado en los temarios, con una parte teórica y práctica a modo que los conocimientos obtenidos puedan complementarse con los ejercicios adecuados.



ANEXO I. DIAPOSITIVAS

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE INGENIERÍA
FUNDAMENTOS DE QUÍMICA ORGÁNICA Y APLICACIONES EN CIENCIAS DE LA TIERRA
YISEL ANAID ANIMAS GÓMEZ
LUISA ADRIANA TORTOLERO CAMACHO
ING. MARCO RUBIO

CONTENIDO

- I. Química Orgánica: Fundamentos Básicos
- II. Clasificación de Hidrocarburos
- III. Alcanos
- IV. Alquenos
- V. Alquinos
- VI. Hidrocarburos Aromáticos
- VII. Grupos Funcionales
- VIII. Fraccionamiento SARA
- IX. Análisis del petróleo por cromatografía de gases
- X. Biomarcadores

QUÍMICA ORGÁNICA: FUNDAMENTOS BÁSICOS

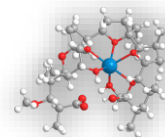
DEFINICIÓN

Ciencia que estudia la estructura, síntesis, propiedades y reactividad de compuestos formados principalmente por Carbono e Hidrógeno.

ORIGEN

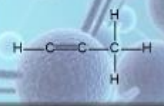
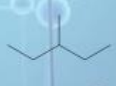
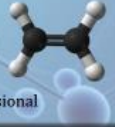
- En 1807 Jöns Jacob Berzelius introdujo el término Química Orgánica, deduciendo que los compuestos orgánicos no se podían sintetizar en el laboratorio.
- En 1823 Friedrich Wöhler observó que el Cianato de Amonio formaba cristales que pertenecían a una molécula orgánica (urea), concluyendo que los compuestos orgánicos sí se pueden sintetizar en el laboratorio.

Urea



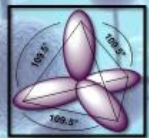


Fórmula Química

Es la forma de escribir una molécula con la información de los elementos que constituyen el compuesto y la proporción de dichos elementos. Existen varias formas de representar una fórmula química:

Empírica CH	Molecular Condensada C_4H_{10} Semidesarrollada $CH_2 = CH - CH_2 - CH_3$ Desarrollada 	Geométrica Plana  Tridimensional 
-----------------------	--	---

Hibridación

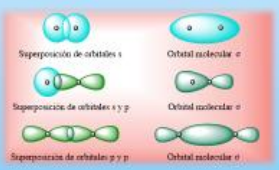
Es la combinación de funciones de onda individuales para los orbitales atómicos s y p a fin de obtener funciones de onda para nuevos orbitales atómicos híbridos con diferentes formas y orientaciones.

<p>Hibridación sp^3 Combinación de los orbitales 2s, 2px, 2py y 2pz con lo cual se obtienen 4 orbitales híbridos constituidos por 1 parte del orbital s y 3 partes del orbital p.</p> 	<p>Hibridación sp^2 Combinación de 3 orbitales: 2s, 2px y 2py con lo cual se obtienen 2 orbitales híbridos constituidos por 1 parte del orbital s y 2 partes del orbital p, quedando el orbital 2pz sin combinar.</p> 	<p>Hibridación sp Combinación de los orbitales 2s, 2px con lo cual se obtienen 2 orbitales híbridos constituidos por 1 parte de orbital s y 1 parte de orbitales p, quedando los orbitales 2py y 2pz sin combinar.</p> 
--	--	---

De acuerdo al tipo de orbitales y su orientación, las uniones químicas se clasifican en:

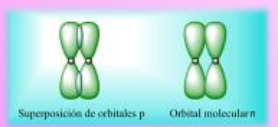
Enlace sigma (σ)

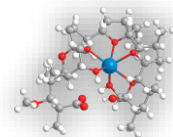
Se forma como producto de la hibridación de dos orbitales s, un orbital s y uno p, o dos orbitales p que se hibridan lateralmente.



Enlace pi (π)

Se forma por la hibridación de dos orbitales atómicos p. Los orbitales d también pueden participar en este tipo de enlace.





En resumen, las características más representativas de la hibridación del Carbono son las siguientes:

Hibridación	Tipo de enlaces	Orbitales moleculares	Ángulo de enlace	Geometría molecular	Familia de Hidrocarburo
sp ³	Simple	σ	109.5°	Tetraédrica	Alcanos
sp ²	Doble	1 σ y 1 π	120°	Plana Trigonal	Alquenos
sp	Triple	1 σ y 2 π	180°	Lineal	Alquinos

Tabla 1. Hibridación del Carbono

CLASIFICACIÓN DE HIDROCARBUROS

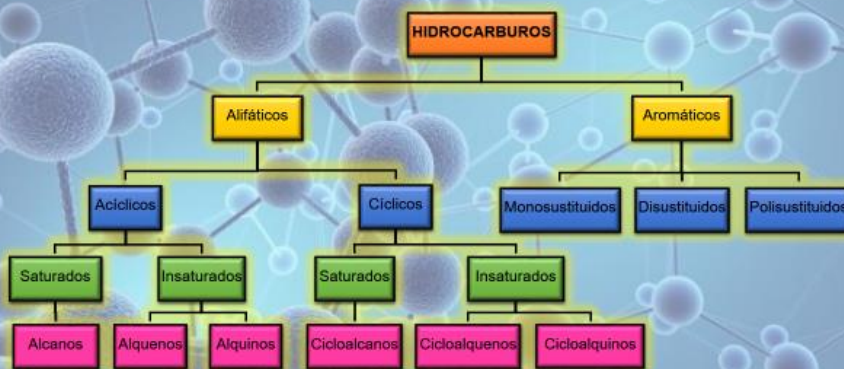


Figura 1. Clasificación de Hidrocarburos

Hidrocarburos Alifáticos

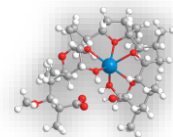
Son hidrocarburos constituidos por carbono e hidrógeno y sin ningún anillo aromático; pueden ser de cadena abierta o cerrada.

Cadena abierta

- Lineal.- los átomos de carbono se pueden escribir en línea recta.
- Ramificada.- tiene cadenas secundarias que parten de alguno de los carbonos principales de cadena lineal.

Cadena cerrada

- Se forma al unirse dos átomos terminales de una cadena lineal. Reciben el nombre de ciclos



Hidrocarburos Aromáticos

Son hidrocarburos que poseen en su estructura por lo menos un anillo bencénico.

Figura 2. Representación de anillo unitario bencénico.

ALCANOS

También llamados parafinas, los alcanos son hidrocarburos saturados de enlace sencillo cuya fórmula general es:

C_nH_{2n+2}

Donde:
n=número de átomos de carbono.

PROPIEDADES FÍSICAS

Las propiedades de los alcanos dependen de su composición y estructura, sus moléculas presentan enlaces covalentes y están constituidos por elementos con electronegatividades relativamente iguales, haciendo que las moléculas de los alcanos sean no polares.

Estado físico

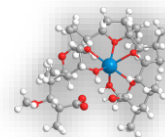
- Bajo condiciones estándar, los alcanos desde el CH₄ hasta el C₄H₁₀ son gases; desde el C₅H₁₂ hasta C₁₇H₃₆ son líquidos; y los posteriores a C₁₈H₃₈ son sólidos.

Punto de ebullición

- El punto de ebullición de los alcanos está determinado principalmente por el peso molecular, por lo que al incrementar el peso molecular también aumenta el punto de ebullición de cada miembro de la serie, conservando una tendencia casi lineal.

Punto de fusión

- El punto de fusión aumenta a medida que crece el peso molecular. Este aumento no es tan geométrico, debido a que los alcanos con número par de átomos de carbono (p. ej. C₂, C₄, C₆,...) se compactan en el estado cristalino, provocando que las fuerzas de atracción entre las cadenas individuales sean mayores y, por consiguiente, los puntos de fusión lo sean también.



Densidad

- La densidad de los alcanos aumenta conforme aumenta el número de átomos de carbono, pero permanece generalmente inferior a la del agua (1 gr/cm³).

Solubilidad

- Los alcanos debido a su baja polaridad son insolubles en agua y solo se disuelven en solventes orgánicos no polares como *n*-heptano, *n*-heptano, etanol, etc.

Conductividad

- Son malos conductores de electricidad y no se polarizan sustancialmente por un campo eléctrico.

NOMENCLATURA

Para nombrar a los compuestos orgánicos se usa sistema de nomenclatura IUPAC, en donde un nombre está formado por tres partes: prefijos, principal y sufijos. Los prefijos indican los sustituyentes de la molécula; el sufijo indica el grupo funcional de la molécula; y la parte principal el número de carbonos que posee.

Número de átomos de carbono	Prefijos	Nombre
1	Met	Metano
2	Et	Etano
3	Prop	Propano
4	But	Butano
5	Pent	Pentano
6	Hex	Hexano
7	Hept	Heptano
8	Oct	Octano
9	Non	Nonano
10	Dec	Decano

Tabla 2. Prefijos

➤ Alcanos Lineales

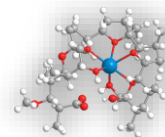
Se enumeran los carbonos de la molécula para determinar el prefijo adecuado que le corresponda e indique la cantidad de átomos de carbonos con la terminación "ano", por ejemplo:



➤ Alcanos Ramificados

Para nombrar a los alcanos ramificados se requiere conocer a los radicales alquilo, tales como:





Las reglas a seguir para nombrar los alcanos de cadena ramificada (IUPAC) son:

- **Elegir la cadena principal:** La cadena principal es aquella que presenta el mayor número consecutivo de átomos de carbono. En el caso de existir varias cadenas con la misma longitud, se elige aquella que tenga más ramificaciones.
- **Numerar la cadena principal:** Empezando por un extremo a cada átomo de carbono de la cadena principal se le asigna un número (localizador) de forma que las ramificaciones (radicales) queden en los números más bajos. En el caso de tener varias posibilidades se elige la opción en la que los nombres de los radicales ordenados alfabéticamente tengan el menor localizador.

- **Nombrar el compuesto:** Se nombra cada radical por orden alfabético y se separan con guiones, si existe más de un radical con el mismo nombre se añade el prefijo que indica el número de veces que se repite di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta- ... (2, 3, 4, 5, 6, 7, ...). Una vez nombrados los radicales indicamos delante de cada radical su localizador, en el caso de tener varios radicales del mismo tipo se separan por comas. Por último se añade la cadena principal como si fuera un alcano de cadena lineal. Por ejemplo:



En la nomenclatura IUPAC se aceptan los siguientes nombres especiales para grupos alquilo ramificados.

- ✓ Iso: un grupo metilo en el penúltimo carbono del radical.
- ✓ Sec: un grupo metilo sobre el carbono de valencia libre del radical.
- ✓ Terc: dos grupos metilos sobre el carbono de valencia libre del radical.
- ✓ Neo: dos grupos metilos sobre el segundo carbono del radical.

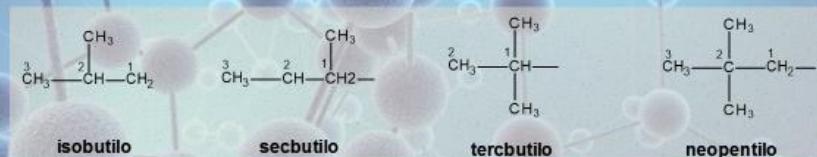
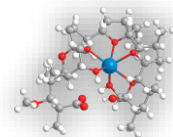


Figura 3. Nombres especiales para grupos alquilo ramificados



REACCIONES

Los alcanos muestran una reactividad relativamente baja porque sus enlaces de carbono son relativamente estables y no pueden ser fácilmente fragmentados. Presentan las siguientes reacciones:

- Combustión.- reacción de oxidación en la cual todos los átomos de carbono de la molécula se convierten en CO₂ (gas) y los átomos de hidrógeno en H₂O (líquido).
- Halogenación.- un átomo de hidrógeno se sustituye por un átomo de halógeno para formar un haluro de alquilo (R-X), donde X es un halógeno, principalmente Cl, Br y un haluro de hidrógeno.
- Pirólisis.- proceso en el que una molécula se rompe por la acción del calor y normalmente en condiciones controladas. Cuando se pirolizan los alcanos, los enlaces carbono-carbono se rompen fácilmente para producir radicales alquilo más pequeños.

CICLOALCANOS

Los cicloalcanos son hidrocarburos cíclicos, que forman anillos de átomos de carbono. Son compuestos saturados (alcanos) que, al formar dichos anillos, contienen dos átomos de hidrógeno menos que los alcanos no cíclicos pero con el mismo número de átomos de carbono. Su fórmula molecular es: C_nH_{2n}

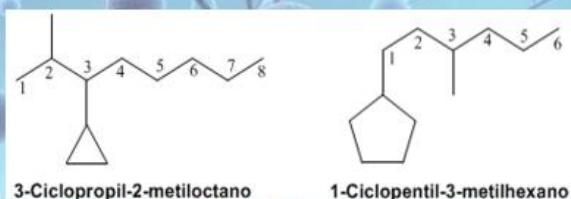
PROPIEDADES FÍSICAS

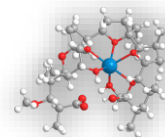
Las tendencias en las propiedades físicas en los hidrocarburos cíclicos guardan gran similitud con aquellas de los hidrocarburos de cadena abierta.

Son compuestos poco polares, insolubles en agua, sin embargo sus puntos de fusión y ebullición son superiores a los de cadena abierta debido a que las estructuras cristalinas son más compactas y también las densidades son más altas

NOMENCLATURA

Se nombran igual que los alcanos de cadena abierta con el mismo número de átomos de carbono, pero siempre con el prefijo ciclo.





ALQUENOS

Los alquenos son hidrocarburos insaturados que presentan como grupo funcional un doble enlace, en el cual ocurren la mayoría de las reacciones químicas a que son sometidos durante la maduración del petróleo.

Su fórmula es:

$$C_nH_{2n}$$

PROPIEDADES FÍSICAS

Debido a su doble enlace, las propiedades físicas de los alquenos se modifican ligeramente con respecto a las de los alcanos

Estado físico	A temperatura ambiente los alquenos de C_2H_4 a C_4H_8 son gases, de C_5H_{10} a $C_{15}H_{30}$ son líquidos y de $C_{16}H_{32}$ en adelante son sólidos, fusibles y volátiles sin descomposición.
Punto de ebullición	Los puntos de ebullición aumentan ligeramente al aumentar el peso molecular. Como en los alcanos, la ramificación aumenta la volatilidad y disminuye los puntos de ebullición.
Punto de fusión	Incrementa a medida que es mayor el número de átomos de carbono.
Densidad	Son menos densos que el agua y su densidad se encuentra alrededor de 0.7 gr/ml.
Conductividad	Como compuestos apolares los alquenos son insolubles en agua pero bastante solubles en disolventes orgánicos apolares como hexano, disolventes halogenados y éteres.
Solubilidad	Son débiles conductores debido a la presencia del enlace π .

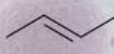
Tabla 3. Propiedades físicas de los alquenos

NOMENCLATURA

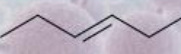
Los alquenos se nombran reemplazando la terminación "ano" del compuesto equivalente saturado (alcano) por la terminación "eno".

➤ **Alcanos Lineales**


Debido a su doble enlace, los alquenos utilizan localizadores de cadena en el nombre para indicar la posición del mismo cuando hay más de un doble enlace en el compuesto, así como prefijos multiplicativos (di-, tri-, tetra-, etc.). La cadena se enumera con la finalidad de darle al o a los dobles enlaces el localizador más bajo, por ejemplo:



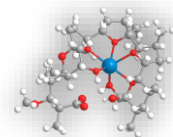
2-buteno



3-hexeno

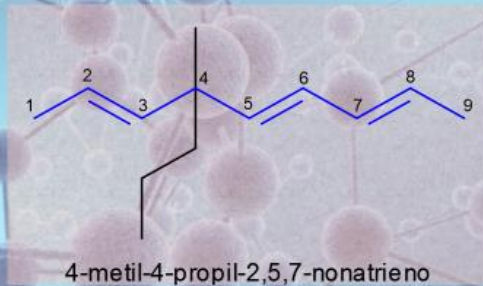


1,3-octadieno



➤ **Alcanos Ramificados**

Se siguen las mismas reglas de nomenclatura de los alcanos y los alquenos lineales. Por ejemplo:



REACCIONES

Los alquenos reaccionan a una gran cantidad de reactivos, siendo su reacción característica la adición al enlace doble.

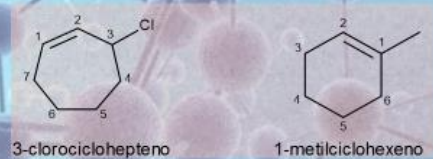
- Hidrogenación.- en estas reacciones se producen alcanos; esta reacción consiste en la adición de H₂ a un enlace múltiple.
- Adición de halógenos.- se adicionan halógenos.
- Hidratación de alquenos catalizada por ácidos.- se añade agua a los alquenos para producir alcoholes en un proceso llamado deshidratación.
- Oxidación.- los alquenos se oxidan dando lugar a una gran variedad de productos.
- Polimerización.- se forman moléculas de gran peso a partir de monómeros.

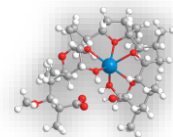
CICLOALQUENOS

Los cicloalquenos son hidrocarburos cíclicos, que tienen un doble enlace en el ciclo. Su fórmula molecular es: C_nH_{2n-2}

NOMENCLATURA

Se nombran igual que un alqueno, con el mismo número de átomos de carbono, anteponiéndole la palabra ciclo.





ALQUINOS

Se llaman alquinos a los hidrocarburos que presentan un triple enlace entre sus átomos de carbono. Dependiendo de la posición del triple enlace en la cadena, reciben el nombre de Monosustituídos (enlace al final) y Disustituídos (enlaces internos).

Su fórmula es:

$$C_nH_{2n-2}$$

PROPIEDADES FÍSICAS

Debido a su doble enlace, las propiedades físicas de los alquenos se modifican ligeramente con respecto a las de los alcanos

Estado físico	<ul style="list-style-type: none"> A temperatura y presión ambiente los alquinos de C_2H_2 a C_4H_6 son gases, en el rango de C_5H_8 a C_7H_{12} son líquidos y de C_8H_{14} en adelante son sólidos.
Punto de ebullición	<ul style="list-style-type: none"> Los puntos de ebullición muestran el aumento usual con el incremento del número de carbonos en la molécula y el efecto habitual de ramificación de las cadenas
Punto de fusión	<ul style="list-style-type: none"> A medida que aumenta el peso molecular, aumenta también el punto de fusión
Densidad	<ul style="list-style-type: none"> Incrementa conforme aumenta el número de carbonos y son menos densos que el agua.
Solubilidad	<ul style="list-style-type: none"> Son insolubles en agua, pero bastante solubles en disolventes orgánicos usuales y de baja polaridad, tales como: éter, benceno, tetracloruro de carbono, etc.

NOMENCLATURA

Las reglas de nomenclatura de la IUPAC para nombrar a los alquinos son las mismas que utilizamos en los alquenos, a diferencia de que en los alquinos la terminación es "ino".

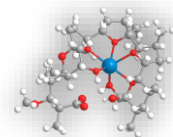
➤ **Alcanos Lineales**

Se utilizan los localizadores que indican en que posición se encuentra el triple enlace:

2-pentino

3-heptino

1,3-nonadieno



➤ **Alcanos Ramificados**

Se siguen las mismas reglas de nomenclatura de los alquenos ramificados y los alquinos lineales. Por ejemplo:

7-dimetil-3-5-nonadieno

REACCIONES

El triple enlace de los alquinos es menos reactivo que el doble enlace de los alquenos, pero presentan las mismas reacciones por adición que éstos. Entre las principales reacciones que presentan los alquinos se encuentran las siguientes:

- Hidrogenación catalítica.- adición de H_2 en presencia de un catalizador para formar alcanos.
- Adición de halógenos.- se adicionan halógenos. Los alquinos reaccionan con cloro y bromo para formar tetrahaloalcanos.
- Hidratación de alquinos.- en esta reacción se forman cetonas con alcoholes como producto intermediario.

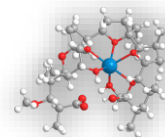
CICLOALQUINOS

Hidrocarburos alicíclicos con enlaces triples entre carbonos y muy poco frecuentes en la naturaleza. Su fórmula general es C_nH_{2n-2}

NOMENCLATURA

Siguen las mismas reglas de nomenclatura que los alquinos y cicloalquenos.

Ciclopenteno 3-bromo-5-metil-ciclopenteno



HIDROCARBUROS AROMÁTICOS

Conocidos también como "arenos", los hidrocarburos aromáticos son hidrocarburos cíclicos basados en el anillo de benceno como unidad estructural. Los ejemplos más comunes y más simples en la naturaleza, sintetizados y en el petróleo son:

Benceno
Tolueno
Naftaleno

Figura 4. Hidrocarburos Aromáticos

CLASIFICACIÓN DE HIDROCARBUROS AROMÁTICOS

➤ Monocíclicos.- son moléculas formadas por un solo anillo aromático; y de acuerdo a la sustitución de hidrógenos en el en el anillo bencénico, se clasifican en:

Monosustituídos

Resultan de la sustitución de un hidrógeno del anillo bencénico.

Disustituídos

El anillo bencénico tiene dos hidrógenos sustituidos.

Polisustituídos

Se tienen más de dos sustituyentes en el anillo bencénico

➤ Policíclicos.- son hidrocarburos formados por la unión de varios anillos bencénicos.

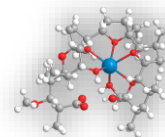
Antraceno
Feneno

Figura 5. Hidrocarburos Policíclicos

➤ Heterocíclicos.- son compuestos formados por anillos que contienen átomos de otros elementos con hibridación sp^2 . Los elementos más comunes en PAH's son: nitrógeno, oxígeno y azufre.

Pyridina
Quinolina
Benzofurano

Figura 6. Hidrocarburos Heterocíclicos



GRUPOS FUNCIONALES

Un grupo funcional es un átomo o conjunto de átomos unidos a una cadena carbonada y que puede ser representada por R para los compuestos alifáticos, y como Ar para los compuestos aromáticos.

Tipo de compuesto	Grupo funcional	Fórmula	Sustituyente	Tipo de compuesto	Grupo funcional	Fórmula	Sustituyente
Halogenuro de alquilo	X=F, Cl, Br o I	R - X		Acido carboxílico	Grupo carboxilo	R - COOH	
Alcohol	Grupo hidroxilo	R - OH		Ester	Grupo acilo	R - COOH - R'	
Eter	Grupo alcoxilo	R - O - R'		Amina	Grupo amino	R - NH ₂	
Aldehído	Grupo carbonilo	R - C(=O)H		Amida	Grupo amido	R - CO - NR ₂	
Cetona	Grupo carbonilo	R - C(=O) - R'					

Tabla 4. Grupos funcionales

FRACCIONAMIENTO SARA

El fraccionamiento SARA se encarga de clasificar crudos a través de una técnica de fraccionamiento que divide el petróleo en cuatro fases principales de acuerdo a su solubilidad y polaridad.



SATURADOS

- Los hidrocarburos saturados son la fracción menos polar y consisten principalmente en parafinas y cicloparafinas.



AROMÁTICOS

- Los aromáticos son cadenas no polares de carbono en las que denominan sistemas de anillos insaturados. Tienen gran capacidad de disolver otros hidrocarburos de alto peso molecular.



RESINAS

- Compuestos con gran cantidad de anillos aromáticos y cadenas laterales nafiénicas y parafínicas, por lo tanto tienen una elevada cantidad de hidrógeno y carbono con pequeñas cantidades de oxígeno, azufre y nitrógeno.



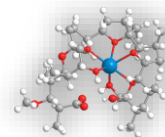
ASFALTENOS

- Hidrocarburos aromáticos altamente polares y de elevado peso molecular y que abarcan un amplio rango de composiciones. Son insolubles en n-alcanos como el n-pentano o n-heptano y solubles en tolueno.

MÉTODOS PARA REALIZAR EL FRACCIONAMIENTO SARA

Los procedimientos para determinar la composición SARA, son los siguientes:

- 1. Cromatografía de capa fina con detección de ionización (TLC-FID).**- se expone la muestra a un solvente, por ejemplo hexano y tolueno de alto rendimiento, diclorometano y metanol, ésta produce iones y electrones al ser puesta en contacto con una llama de hidrógeno y se aplica una diferencia de potencial entre el extremo del quemador y un electrodo colector, produciendo así una intensidad de corriente proporcional a la cantidad de cada sustancia. La primera señal detectada en el cromatograma corresponde a los saturados, la segunda a los aromáticos y la tercera a los polares.



2. **Cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC).**- Es un proceso que se lleva a cabo utilizando presiones muy elevadas. El método inicia removiendo los asfaltenos por precipitación con n-hexano, para posteriormente diluir el aceite restante en dicho solvente e inyectar al sistema a través de una válvula de inyección. Posteriormente se detecta la fracción de saturados por medio del detector RI (índices de refracción) ya que los saturados eluyen primero y no son retenidos por el material de la columna HPLC. A esta fracción le siguen los aromáticos, los cuales son reconocidos en los detectores UV y RI.

3. **Cromatografía por exclusión de tamaño (SEC).**- La cromatografía de exclusión consiste en la precipitación de asfaltenos por la acción de n-alcenos (pentano o heptano), por lo que se realiza una separación de máltenos (SAR) mediante una columna mixta de sílice seguida de alúmina.

ANÁLISIS DEL PETRÓLEO POR CROMATOGRFÍA DE GASES

La cromatografía de gases es una técnica de separación de mezclas complejas basada en el principio de velocidad diferencial a la que viaja dicha mezcla gaseosa por un medio con determinada capacidad de retención para compuestos individuales. A continuación se muestran los sistemas cromatográficos más comunes para separar, detectar e identificar los componentes de una mezcla de acuerdo a su fraccionamiento químico.

Fracciones Saturada y Aromática			Fracción Aromática	Fracción Polar
Cromatografía de Gases			Cromatografía líquida (de alta eficiencia)	
GC-FID GC-TDC <u>Quimioluminiscencia</u>	GC-MS(Q) GC-MS-SIM	GC-MS/MS triple <u>cuadrupolo (QqQ)</u> MIRM	GCxGC-MS-TOF GC-HRMS	HPLC (UV, DAD, ELSD) LC-MS

Tabla 5. Clasificación de métodos cromatográficos

Análisis Cualitativo

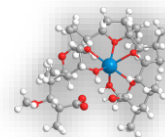
- Cada componente de una muestra gaseosa nos proporciona, además del correspondiente tiempo de retención para compuestos individuales, tres datos adicionales: posición, alto y ancho de los picos que conforman un cromatograma.

Análisis Cuantitativo

- Normalmente, no se pueden identificar todos los componentes que conforman los fluidos de un yacimiento mediante los métodos químicos de separación existentes. Tampoco pueden ser determinados con exactitud las propiedades críticas de componentes pesados similares al C₂₀ o mayores. Este problema puede ser resuelto con ayuda de métodos experimentales y matemáticos, mediante una caracterización aproximada de los compuestos más pesados.

Análisis Experimental

- El análisis experimental son diferentes técnicas que nos proveen datos específicos, ejemplo de ello es la técnica del Punto de Ebullición Real (TBP), la cual provee los datos necesarios para completar esta caracterización, incluyendo cantidades molares y de masa, así como datos clave para cada fracción. Otra técnica es la cromatografía de gases (GC), la cual sirve únicamente para cuantificar la masa de la cantidad de fracciones de carbono del C₇..



BIOMARCADORES

Los biomarcadores son aquellos compuestos que pueden ligarse de forma directa con sus precursores biológicos y cuyo esqueleto (base de carbonos e hidrógenos) se preserva de tal forma que es reconocible a pesar de haber estado sometida a diagénesis y gran parte de la catagénesis.

En la industria a los biomarcadores petroleros se les conoce como "geomarcadores", y algunos de los más distintivos que son más resistentes a la degradación en el ambiente son: pristano, fitano, estereanos, triterpenos y porfirinas. Estos compuestos no degradables se conocen "fingerprints".

El desarrollo de métodos analíticos y la combinación de los mismos, son muy importantes para poder separar, monitorear y detectar las concentraciones absolutas y la estructura de los biomarcadores petroleros.

SEPARACIÓN MEDIANTE TÉCNICAS CROMATOGRÁFICAS

La cromatografía de gases (GC) es la técnica más importante para el estudio de biomarcadores; consiste en introducir la mezcla en la columna capilar del equipo de cromatografía gaseosa para después separar cada compuesto e identificarlo a través de un detector con ionización de flama (FID), donde cada compuesto es ionizado con ayuda de un filamento de metal. Los iones son filtrados por un analizador cuadrupolar con base en la relación carga/masa y un multiplicador de electrones que cuantifica los iones de la masa seleccionada.

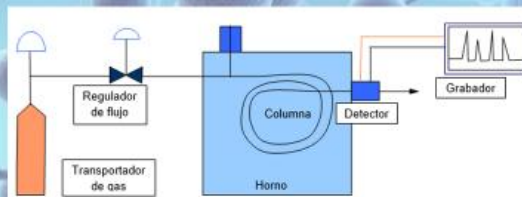


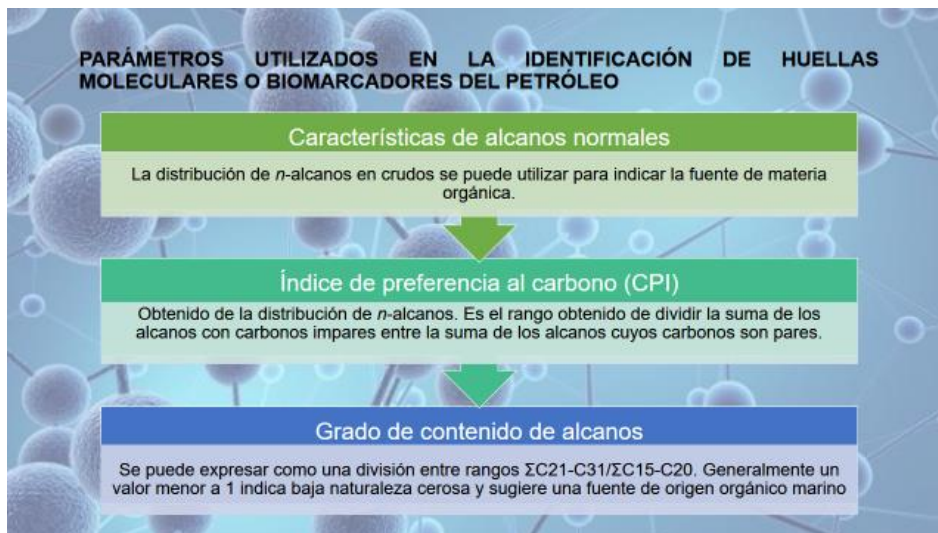
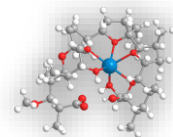
Figura 7. Cromatograma

IDENTIFICACIÓN POR TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS

La Espectrometría de Masas (MS) provee una herramienta para obtener huellas específicas para clases y series homólogas de compuestos resueltos por cromatografía de gases. Esta técnica tiene usos tanto cualitativos como cuantitativos, incluyendo identificación y determinación de la estructura de un compuesto mediante la observación de sus fragmentos ionizados.

RANGO DE DIAGNÓSTICO DE BIOMARCADORES

Los parámetros para diagnosticar biomarcadores son utilizados para correlaciones de aceite, determinación de aporte orgánico, ambientes de depósito, estimación de madurez térmica y evaluación de la biodegradación de aceite in-situ. Los rangos de diagnóstico (RDs) pueden ser calculados cuantitativamente (a partir de concentraciones de compuestos), o semi-cuantitativamente (a partir de datos como áreas de picos y alturas).



RELACIÓN DIBENZOTIOFENO/FENANTRENO Y PRISTANO/FITANO COMO INDICADORES DE AMBIENTE DE DEPÓSITO Y LITOLOGÍA DE ROCAS GENERADORAS

Al combinar los índices Dibenzotiofeno/Fenantreno y Pristano/Fitano en una gráfica cruzada se puede determinar fácilmente el ambiente de depósito así como la litología de la posible roca generadora para distintos tipos de crudo, esta combinación da origen a una clasificación con distintos grupos que integran ambiente de depósito/litología, dentro de los que destacan:

Ambiente de Depósito	Litología
Marino	Carbonatos
Marino / Lacustre	Carbonatos / alto contenido de azufre
Lacustre	Bajo contenido de azufre
Marino / Lacustre	Lutitas
Fluvial / Deltáico	Lutitas carboníferas y carbón

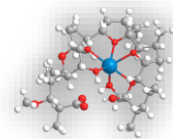
Tabla 6. Relación Pristano/Fitano

Los valores obtenidos de la relación dibenzotiofeno/fenantreno constituyen un indicador confiable de la litología que conforma la roca generadora. Ayudan a evaluar la cantidad de azufre reducido incorporado a la materia orgánica.

Los rangos menores a 1 representan generalmente unidades de lutitas y cuando el valor obtenido es mayor a 1 indica presencia de rocas carbonatadas.

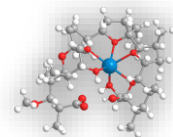
$\frac{\text{Dibenzotiofeno}}{\text{Fenantreno}} < 1 \rightarrow \text{lutita}$ $\frac{\text{Dibenzotiofeno}}{\text{Fenantreno}} > 1 \rightarrow \text{carbonato}$

En el caso de la relación pristano/fitano, sus valores se pueden asociar a las condiciones de oxidación que presenta el ambiente de depósito.



BIBLIOGRAFÍA

1. Andersson, H. A. J., 2007. Limitations to GC-MS determination of sulfur-containing polycyclic aromatic compounds in geochemical, petroleum, and environmental investigations. *Energy & Fuels*, 21, 3375–3384.
2. Akbarzede, K. 2007. Los Asfaltenos: Problemáticos pero ricos en potencial, *Oilfield Review*, Schlumberger.
3. Aske, N., 2002. Characterization of Crude Oil Components, Asphaltene Aggregation and Emulsion Stability by means of Near Infrared Spectroscopy and Multivariate Analysis, Norwegian.
4. Brinkman, B. J. 2000. The role of gas chromatography in compositional analyses in the petroleum industry. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 19, 260–275.
5. Carey, F. A., 2006. *Química Orgánica, Sexta Edición*, University of Virginia, McGraw Hill.
6. Dabrio, M. V. 1971. *Cromatografía de gases. Vol. II*. Ed. Alhambra, S.A. España. 223pp.
7. Hughes, W. B., Holba, A. G., and Dzou, L. I. P., 1995. The ratios of dibenzothiophene to phenanthrene and pristane to phytane as indicators of depositional environment and lithology of petroleum source rocks. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, Vol. 59 Elsevier Science Ltd.
8. Kinghorn R., Marriott P., Dawes P., 2000. Design and implementation of comprehensive gas chromatography with cryogenic modulation. *Journal of Separation Science* 2000. [http:// dx.doi.org/10.1016/j.jsames.2009.03.010](http://dx.doi.org/10.1016/j.jsames.2009.03.010).



9. McCarthy, K., Rojas, K., Niemann, M., Palmowski, D., Peters, K., Stankiewicz, A., 2011. La Geoquímica Básica del Petróleo para la Evaluación de Rocas Generadoras. Schlumberger Oilfield Review.
10. McMurry, J., 2012. Organic Chemistry, Octava Edición, Cornell University, International Thomson Editores.
11. Moustafa, Y. M., and Morsi, R. E., 2012. Biomarkers, Chromatography and Its Applications, Dr. Sasikumar Dhanarasu (Ed.).
12. Panda, S, Andersson, J, Schrader, W. Mass-spectrometric analysis of complex volatile and nonvolatile crude oil components: a challenge. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 389, 1329 –1339 (2007).
13. Powers, D., 2014. Characterization and Asphaltene Precipitation Modeling of Native and Reacted Crude Oils, Thesis, University of Calgary, Alberta.
14. Whitson, C. H., Brulé, M. R., 2000. Phase Behavior. SPE Monograph Volume 20, Henry L. Doherty Series, AIME Society of Petroleum Engineers, 75-84.