



4. Un hidrocarburo, A, conduce, por oxidación a dos compuestos, B y C. B, por oxidación, da únicamente ácido acético; C, en las mismas condiciones, conduce a ácido acético y a otro ácido de fórmula lineal y de masa molecular 102. Se pide determinar las fórmulas de A, B y C, así como sus nombres IUPAC.

Nombre sistemático IUPAC de ácido acético es ácido etanoico.

Enunciado dice "fórmula lineal", y es interpretable si eso limita a lineales no ramificadas

Por ejemplo en wikipedia https://es.wikipedia.org/wiki/Cadena_carbonada habla de "lineales sin ramificaciones" y "lineales ramificadas", pero IUPAC al hablar de cadenas lineales lo acota (pero usa cadena, no fórmula) <http://goldbook.iupac.org/L03546.html>

Referencias:

Resuelto por Basilea en <http://www.docentesconeducacion.es/viewtopic.php?f=92&t=4324>

Resuelto en "Física y Química. Cuerpo de profesores de enseñanza secundaria". Editorial MAD. VVAA, problema 7 página 327

(1) ORGANIC CHEMISTRY, SECOND EDITION; MEHTA, BHUPINDER, MEHTA, MANJU

<https://books.google.es/books?id=MvN6CgAAQBAJ&pg=PA594&lpg=PA594>

Tratado de Química Orgánica (Tomo I, 1ª parte) Química Orgánica Sistemática; F. Klages;

Editorial Reverté; ISBN 84-291-7314-5 Volumen 1, ISBN 84-291-7311-0 Tomo 1,

<https://books.google.es/books?id=nhcGf55Gy58C> página 279

(2) Tratado de Química Orgánica (Tomo I, 2ª parte) Química Orgánica Sistemática; F. Klages;

Editorial Reverté; ISBN 84-291-7315-3 Volumen 2, ISBN 84-291-7311-0 Tomo 1,

<https://books.google.es/books?id=5kJGwEBq5EoC> página 1091

QUÍMICA ORGÁNICA, Robert Thornton Morrison, Robert Neilson Boyd, página 764

http://www.wikipremed.com/03_organicmechanisms.php?mch_code=030208_030

http://organical.org/qo1/Mo-cap8.htm#_Toc484419746

Si B por oxidación da únicamente ácido acético, B tiene que tener un grupo aldehído que se oxida a ácido.

Otra opción sería que en la oxidación de B se rompe una cadena inicial (ozonolisis de alquenos) y se generan dos ácidos acéticos idénticos

Como B ya proviene de una oxidación, asumimos que la cadena se ha roto en A para producir B y C, y que tanto B como C son aldehídos ó cetonas, y será **B = etanal, CH₃-CHO**

Si al oxidar C tenemos un ácido de fórmula lineal y de masa molecular 102, descontando el grupo ácido -COOH de masa 12+2·16+1=45, nos queda una masa de 57, para la que en caso de ser lineal no ramificado podemos comprobar que supone 4 carbonos; CH₃-CH₂-CH₂-CH₂- tiene una masa de 57. Por lo tanto C por oxidación produce ácido pentanoico.

Si al oxidar C tenemos dos productos distintos, no puede ser un aldehído, y podemos pensar en una cetona. Las cetonas no se oxidan en condiciones normales, pero sí con oxidantes fuertes como K₂Cr₂O₇ ó KMnO₄. La oxidación de cetonas produce cosas distintas según la referencia consultada, aunque se coincide en que la rotura puede producirse por ambos lados del grupo carbonilo, lo que genera una mezcla de al menos dos ácidos, que podrían ser los dos indicados. Primero se plantea la tautomería cetona-enol al CH₂ adyacente y con ella el ácido.

(1) Ácido asociado a ruptura al cada lado grupo carbonilo y el resto de la cadena pasa a CO₂ + H₂O

CH₃-CH₂-CH₂-CH₂-CO-CH₃ →

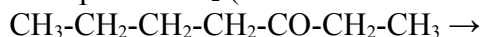
CH₃-CH₂-CH₂-CH₂-COOH + CO₂+ H₂O

ó

CH₃-COOH + CO₂ + H₂O



(2) Ácidos asociados al ataque de doble enlace asociado a la tautomería del grupo carbonilo sin que resto pase a CO₂ (solamente en caso de que quede un C, ya que no se produce ácido metanoico)



ó

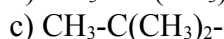
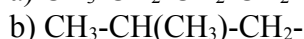
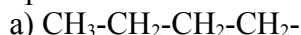


Si contemplamos la primera opción, se obtienen solamente dos ácidos, el ácido adicional al acético es ácido pentanoico, **C=octan-2-ona**

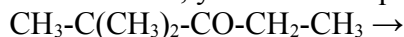
Si contemplamos esta segunda opción que parece más detallada en las referencias, se producen 4 ácidos distintos, luego no cumple los requisitos del enunciado y hay que replantear.

Asumiendo que el enunciado es correcto, la única opción es tomar de manera flexible el concepto de “fórmula lineal” de manera que considere ramificaciones, y estas ramificaciones supongan un impedimento a la tautomería y se limite a dos posibles oxidaciones.

Una “fórmula lineal” de un radical es C_n2_{n+1} (falta un hidrógeno) y para 4 carbonos surgen varias opciones estructurales con la misma fórmula lineal:



En las opciones a y b tenemos la misma situación ya vista que produciría 4 ácidos, por lo que tomamos la c, y tendríamos que C sería



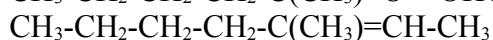
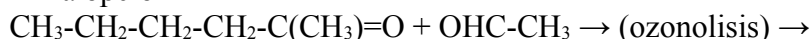
Que cumple los requisitos, luego el ácido adicional al acético es ácido 2,2-dimetilpropanoico

C = 2,2-dimetilpentan-2-ona

Enunciado indica “[la oxidación de C] en las mismas condiciones”, y puede surgir la duda de si son las mismas condiciones que la oxidación de B o que la oxidación de A. La oxidación de B aldehído aunque sea fuerte sigue produciendo ácido al ser un grupo terminal.

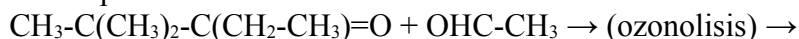
Si unimos B y C para obtener A, asumiendo que ha sido vía ozonolisis

En la opción 1



A = 3-metilhept-2-eno

En la opción 2



A = 3-etil-4,4-dimetilpent-2-eno