

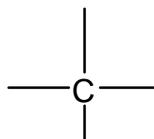
Alcani e Cicloalcani

Francesca Anna Scaramuzzo, PhD

Dipartimento di Scienze di Base e Applicate per l'Ingegneria - Centro di Nanotecnologie Applicate all'Ingegneria

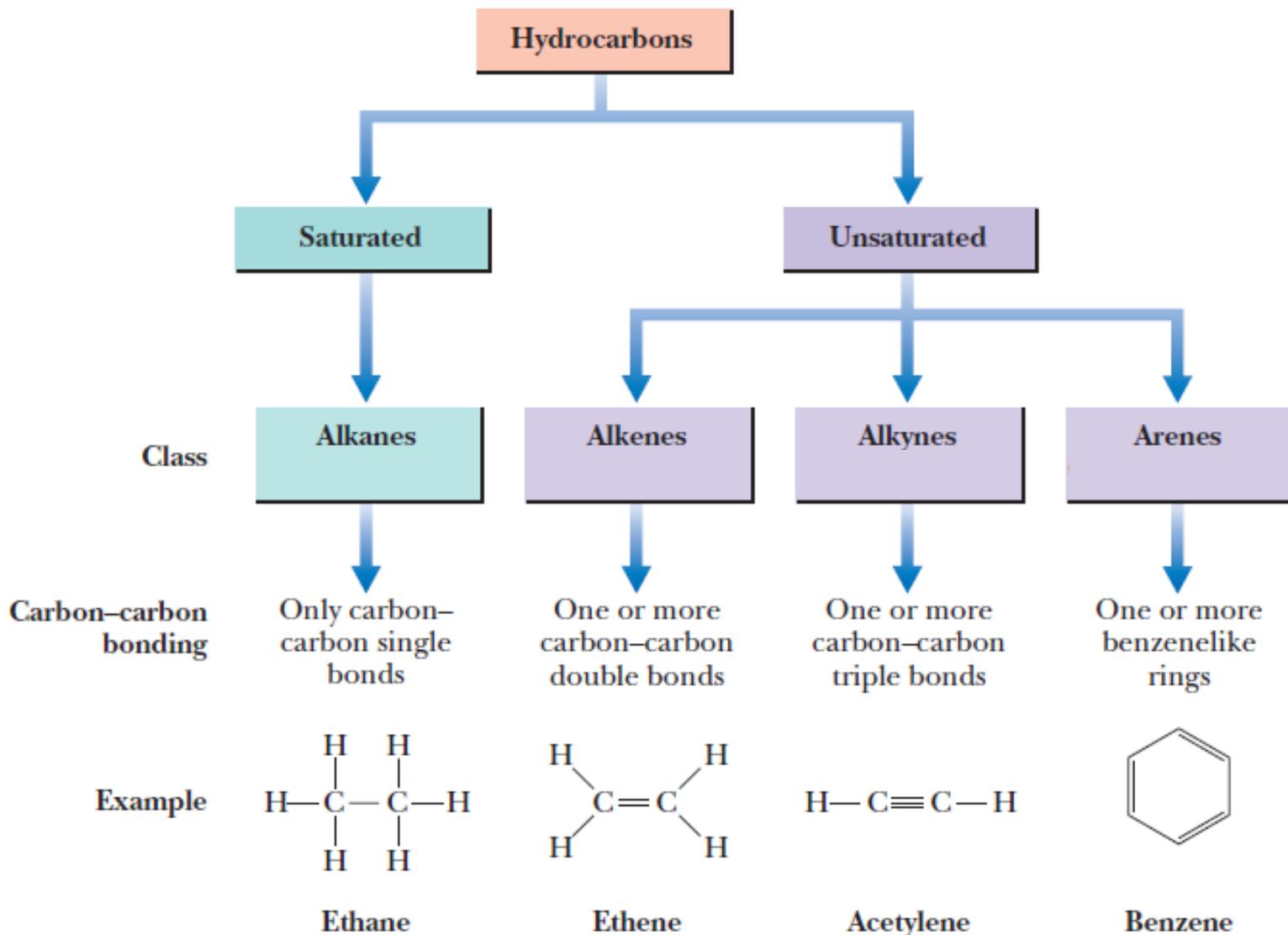
francesca.scaramuzzo@uniroma1.it

Definizione

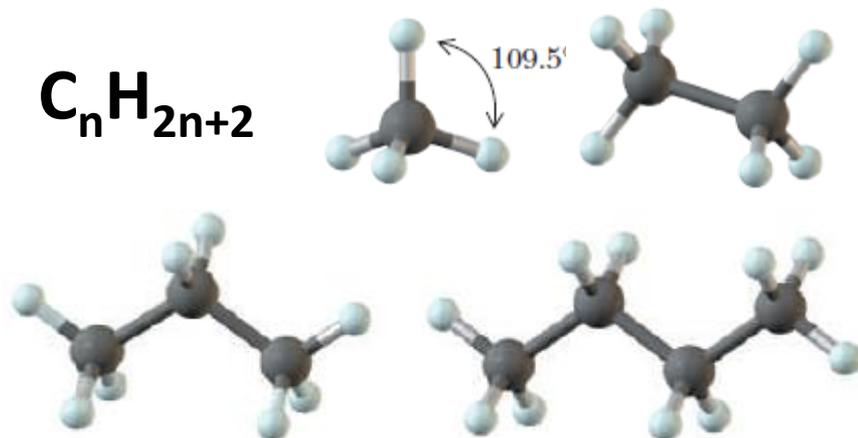
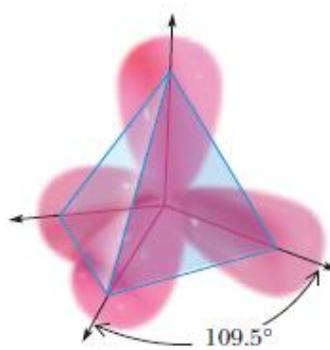
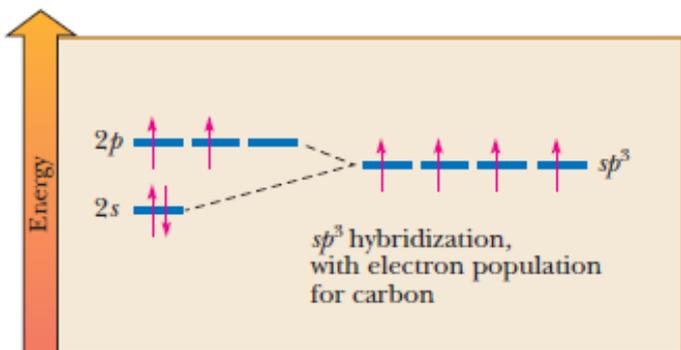


Alcano (idrocarburo alifatico): idrocarburo saturo a catena aperta

Idrocarburo: composto organico contenente solo C e H



Struttura



Isomeri Strutturali

Composti che hanno la stessa formula molecolare ma diversa formula di struttura

Isomers
Different compounds with the same molecular formula

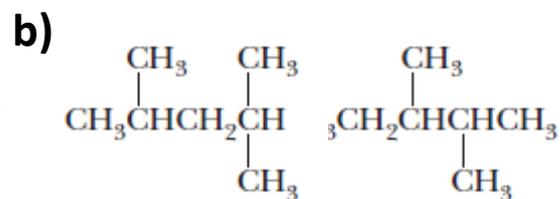
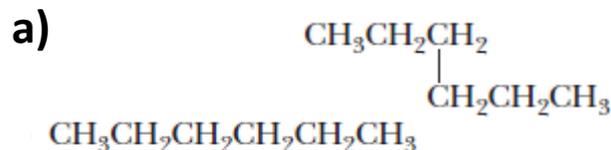
Carbon Atoms	Constitutional Isomers	Carbon Atoms	Constitutional Isomers
1	0	15	4,347
5	3	25	36,797,588
10	75		



Constitutional isomers
Different compounds with the same molecular formula but a different connectivity

Esercizio

Le due coppie di composti seguenti sono lo stesso composto o sono isomeri strutturali?



Nomenclatura IUPAC

Prefisso \longrightarrow Numero di atomi di C

Suffisso \longrightarrow Tipologia di composto \longrightarrow **-ano**

Prefix	Number of Carbon Atoms
meth-	1
eth-	2
prop-	3
but-	4
pent-	5
hex-	6
hept-	7
oct-	8
non-	9
dec-	10
undec-	11
dodec-	12
tridec-	13
tetradec-	14
pentadec-	15
hexadec-	16
heptadec-	17
octadec-	18
nonadec-	19
eicos-	20

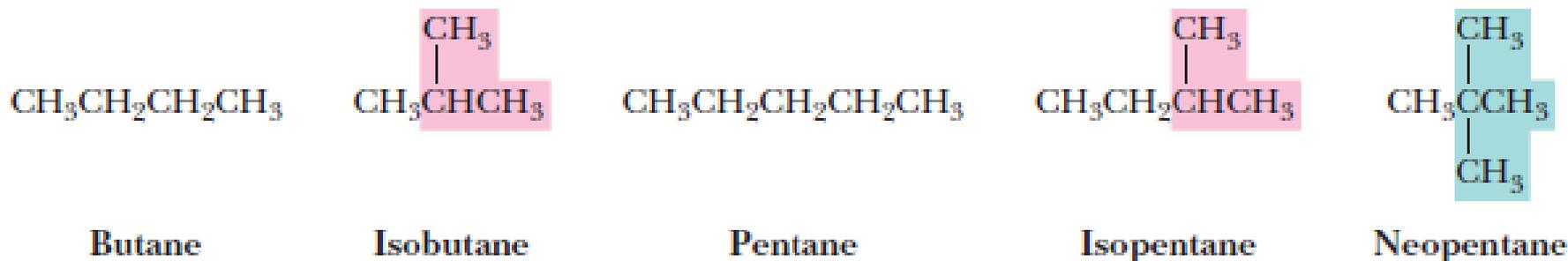
- **Nome base:** catena più lunga di atomi di C
- **Sostituenti:** gruppi legati alla catena di base
- **Posizione dei sostituenti:** numeri più bassi possibile
- **Più sostituenti uguali:** numero di ripetizioni indicato con un prefisso

Gruppo alchilico -R: gruppo sostituyente derivato da un alcano per rimozione di un H

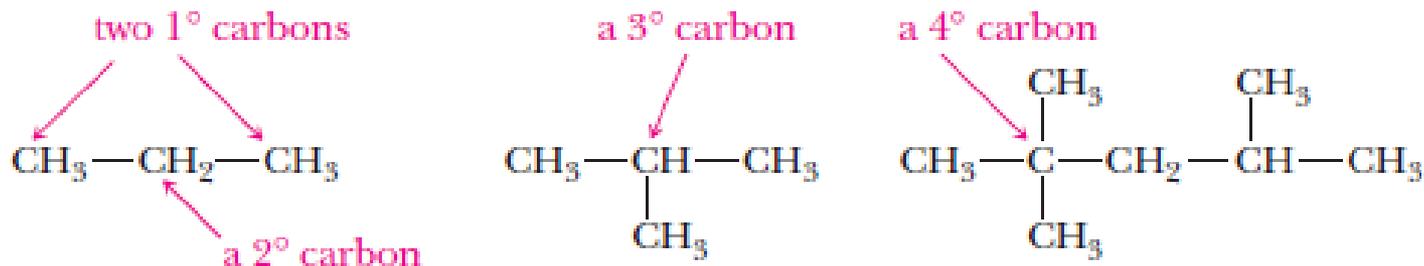
Name	Condensed Structural Formula	Name	Condensed Structural Formula
Methyl (Me)	$-\text{CH}_3$	1,1-Dimethylethyl (<i>tert</i> -butyl, <i>t</i> -Bu)	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{CCH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$
Ethyl (Et)	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	Pentyl	$-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
Propyl (Pr)	$-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	3-Methylbutyl (isopentyl)	$\begin{array}{c} -\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHCH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$
1-Methylethyl (isopropyl, <i>i</i> Pr)	$\begin{array}{c} -\text{CHCH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	2-Methylbutyl	$\begin{array}{c} -\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$
Butyl (Bu)	$-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	2,2-Dimethylpropyl (neopentyl)	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{CH}_2\text{CCH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$
2-Methylpropyl (isobutyl, <i>i</i> Bu)	$\begin{array}{c} -\text{CH}_2\text{CHCH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$		
1-Methylpropyl (<i>sec</i> -butyl, <i>s</i> -Bu)	$\begin{array}{c} -\text{CHCH}_2\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$		

Nomenclatura comune

Il numero totale di atomi di C determina il nome del composto



Classificazione di atomi di C e H



- Gli atomi di C si classificano in base al numero di C a cui sono legati
- Gli atomi di H si classificano a seconda del tipo di C a cui sono legati
- Gli atomi di H si dicono equivalenti se hanno lo stesso intorno chimico

Nomenclatura IUPAC: regola generale

Prefisso → Numero di atomi di C

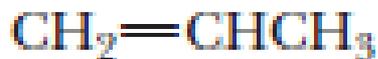
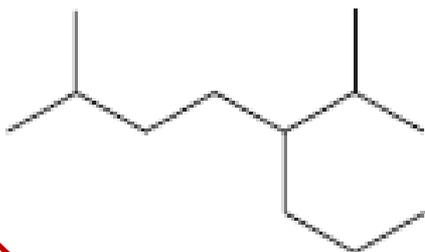
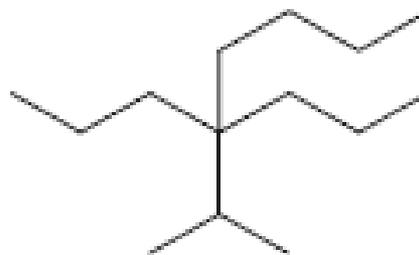
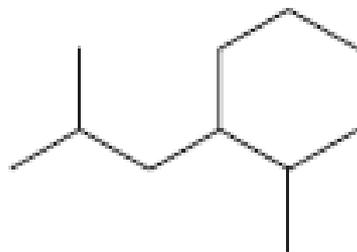
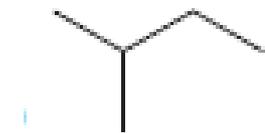
Infisso → Tipo di legami C-C

Suffisso → Classe di composto

Infix	Nature of Carbon-Carbon Bonds in the Parent Chain
-an-	all single bonds
-en-	one or more double bonds
-yn-	one or more triple bonds

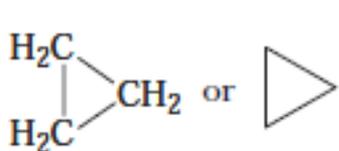
Suffix	Class of Compound
-e	hydrocarbon
-ol	alcohol
-al	aldehyde
-amine	amine
-one	ketone
-oic acid	carboxylic acid

Esercizio: Attribuire il corretto nome IUPAC ai seguenti composti e indicare i carboni mari, secondari, terziari e quaternari

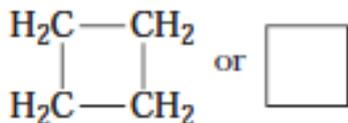


Cicloalcani

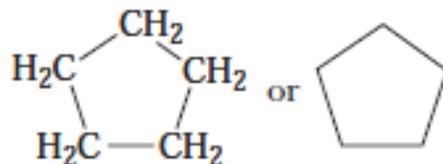
Cicloalcano: idrocarburo saturo a catena chiusa (idrocarburo saturo ciclico)



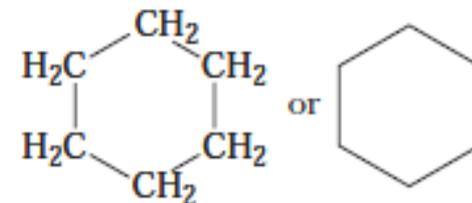
Cyclopropane
 C_3H_6



Cyclobutane
 C_4H_8



Cyclopentane
 C_5H_{10}

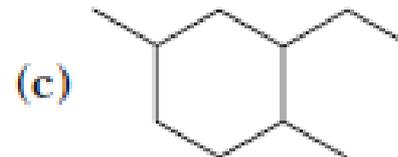
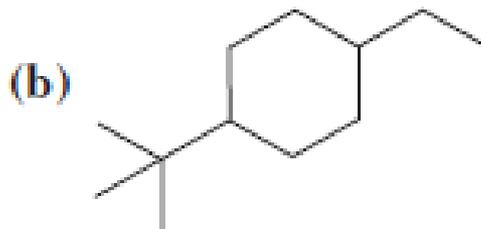
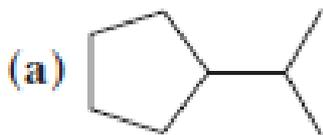


Cyclohexane
 C_6H_{12}



- **Nome base:** ciclo + nome del corrispondente alcano a catena aperta
- **Sostituenti:** anello numerato in base all'ordine alfabetico dei sostituenti e attribuendo loro i numeri più bassi possibile

Esercizio: Attribuire il corretto nome IUPAC ai seguenti composti



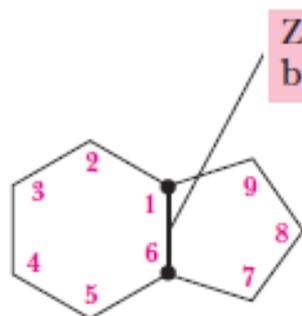
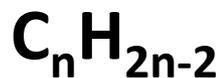
Bicicloalcani e spiroalcani

Bicicloalcano: alcano con due anelli che condividono due atomi di C

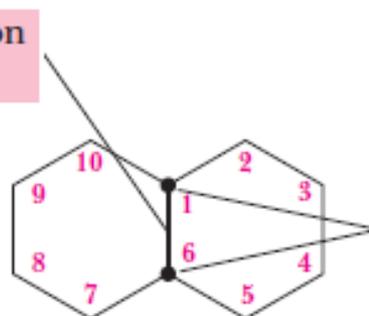
Spiroalcano: alcano con due anelli che condividono un atomo di C

Atomi a testa di ponte: atomi di C condivisi

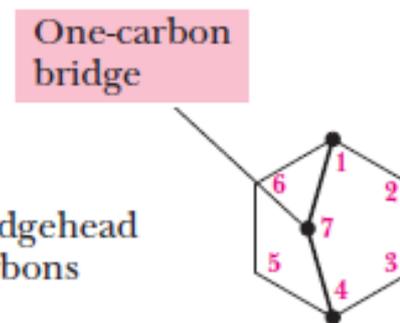
Ponti: catene che uniscono i C a testa di ponte



Bicyclo[4.3.0]nonane
(Hydrindane)



Bicyclo[4.4.0]decane
(Decalin)



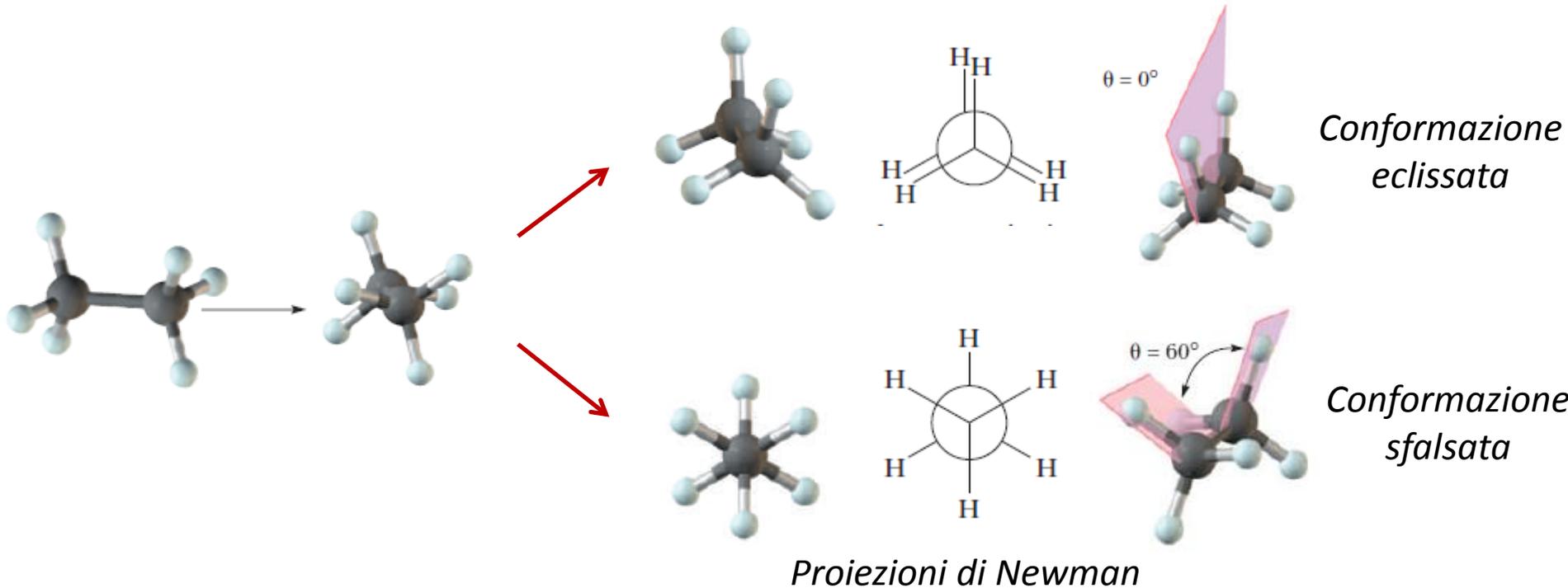
Bicyclo[2.2.1]heptane
(Norbornane)



Spiro[4.2]heptane

Conformazione degli alcani

Conformazione: ogni disposizione tridimensionale degli atomi di una molecola che risulta dalla rotazione attorno ai legami singoli

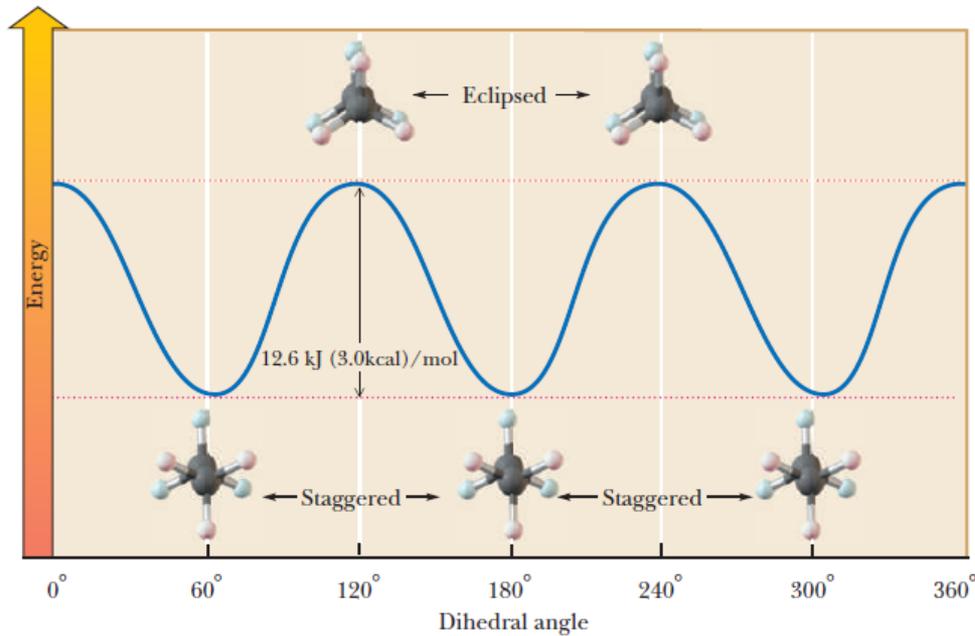


Angolo diedro: angolo formato da due piani intersecanti

Tensione di torsione: forza che si oppone alla rotazione di una parte di una molecola intorno ad un legame, mentre l'altra parte è mantenuta ferma

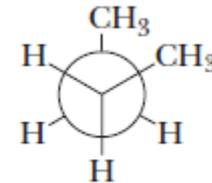
Tensione di interazione di non legame: tensione tra atomi non legati tra loro che sono forzati a stare anormalmente vicini

Conformazione degli alcani

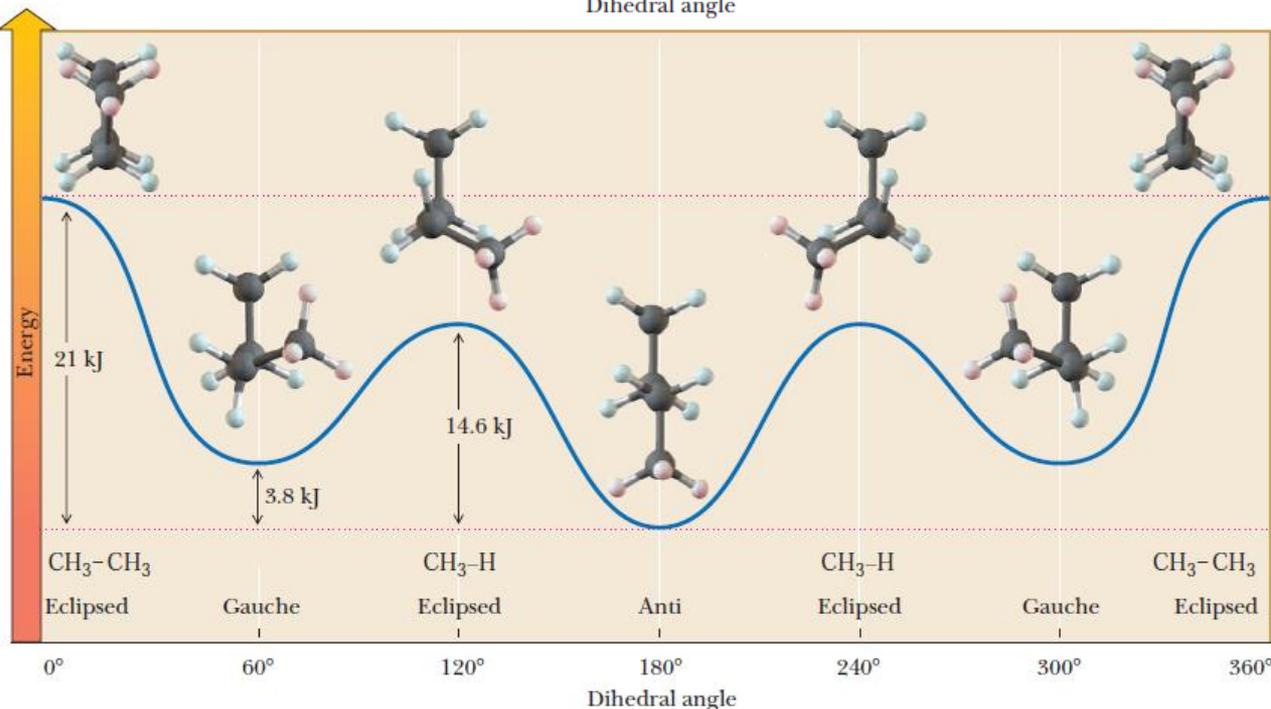


Etano: 1 conformazione eclissata e 1 conformazione sfalsata limite

Butano: 2 conformazioni eclissate e 2 conformazioni sfalsate limite

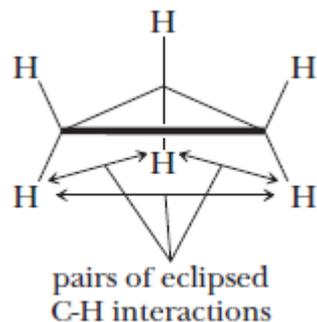


$$\Delta G^\circ = -RT \ln K_{eq}$$

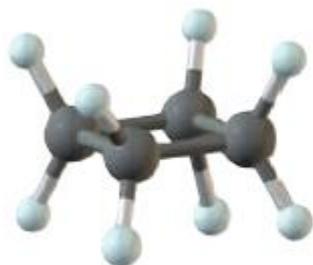


Conformazione dei cicloalcani

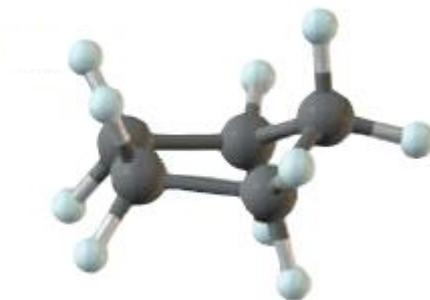
Tensione angolare: tensione derivante da un angolo di legame distorto rispetto al suo valore normale



116 kJ (27.7 kcal)/mol



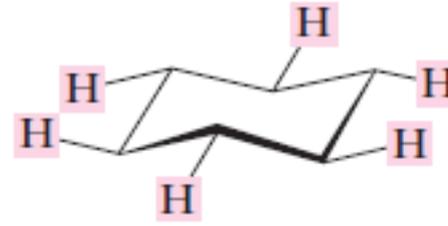
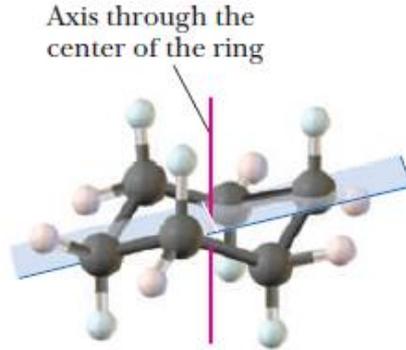
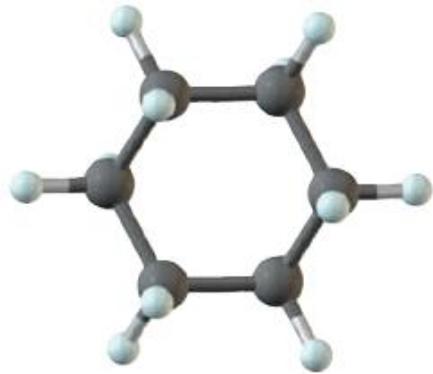
110 kJ (26.3 kcal)/mol



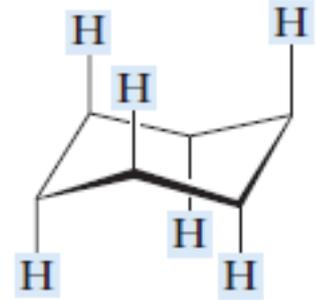
27 kJ (6.5 kcal)/mol

Conformazione dei cicloalcani

Tensione angolare: tensione derivante da un angolo di legame distorto rispetto al suo valore normale



Posizione equatoriale

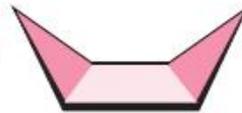


Posizione assiale

Twist this carbon up

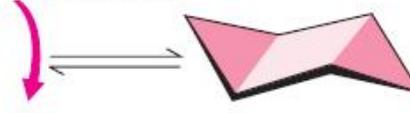


Chair conformation

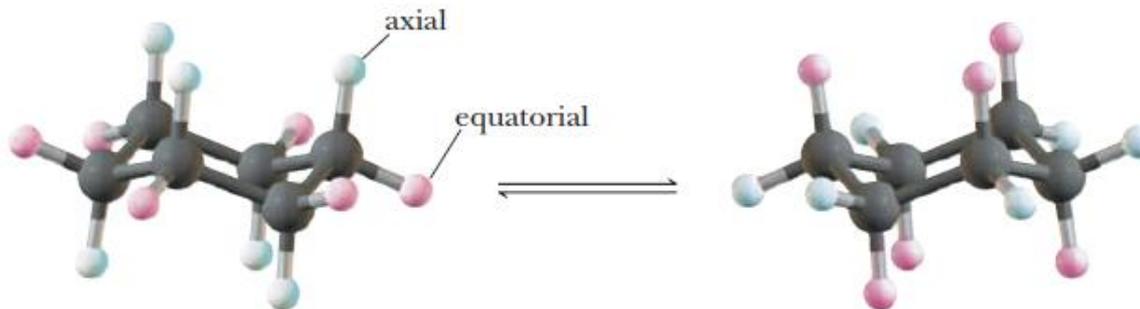


Boat conformation

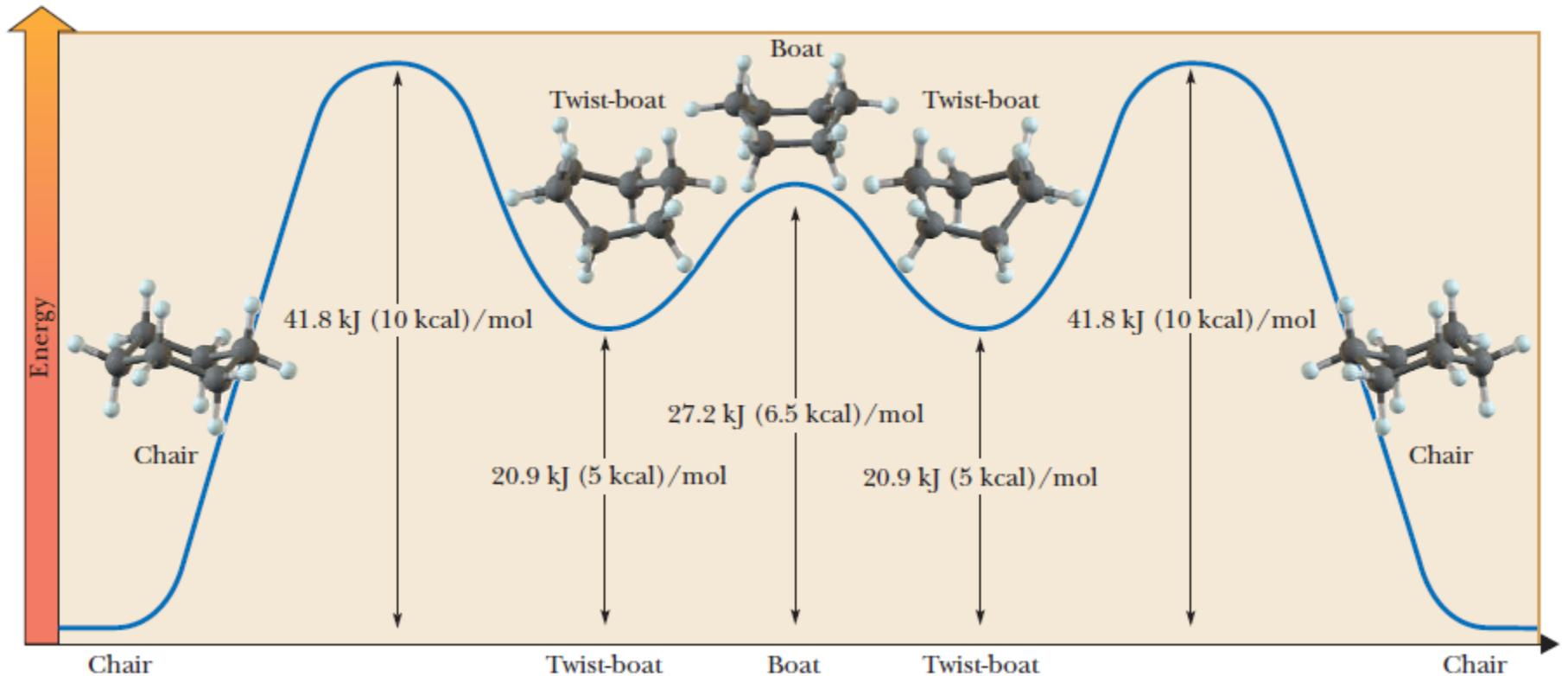
Twist this carbon down



Chair conformation

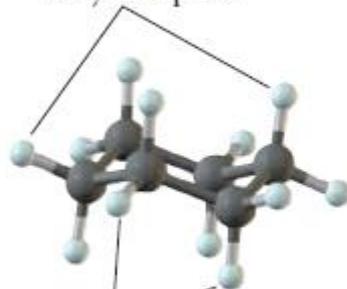


Conformazione dei cicloalcani



(a) Chair

These hydrogens are very far apart.



These hydrogens are staggered.

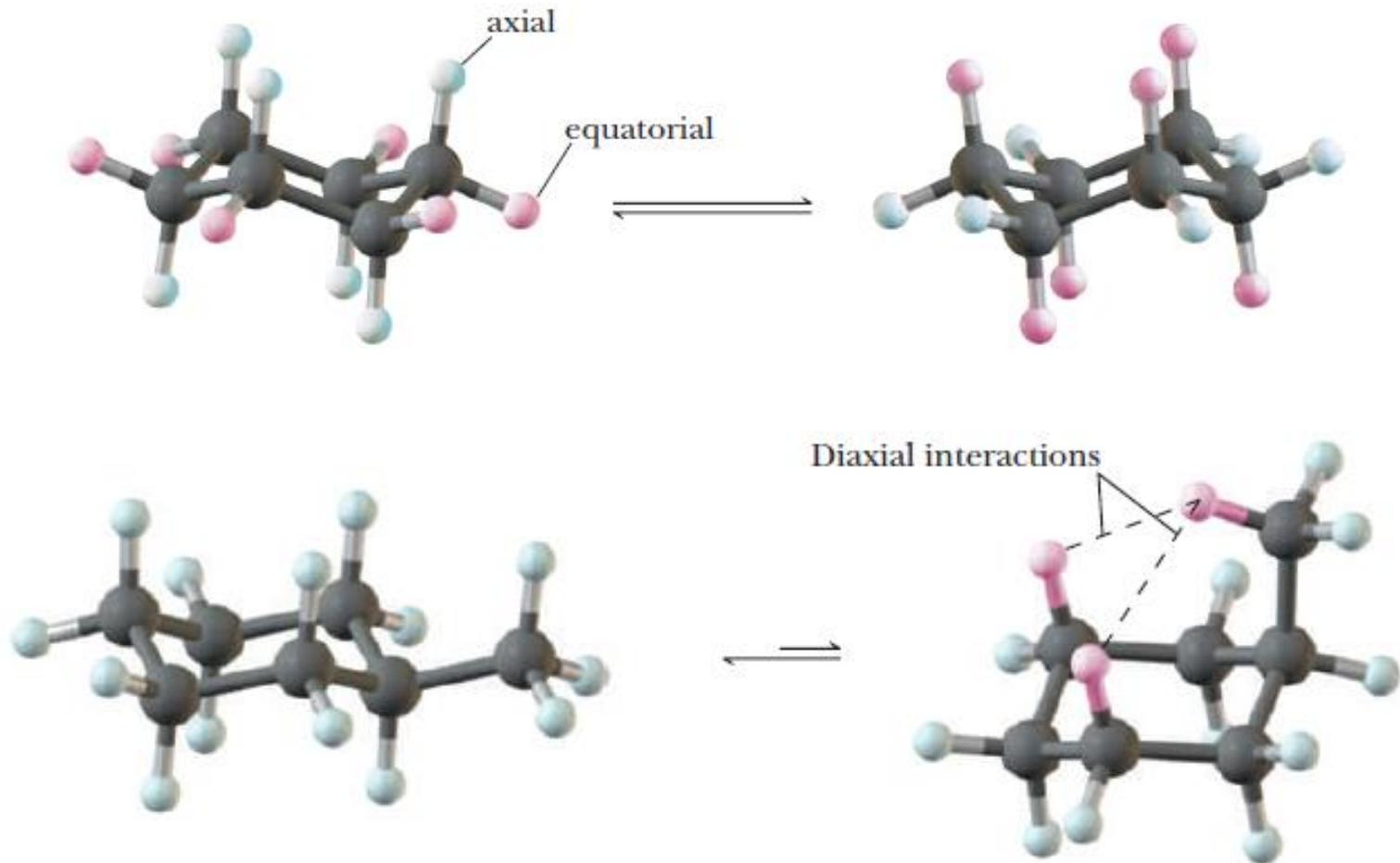
(b) Boat

"Flagpole" H are now almost in contact.



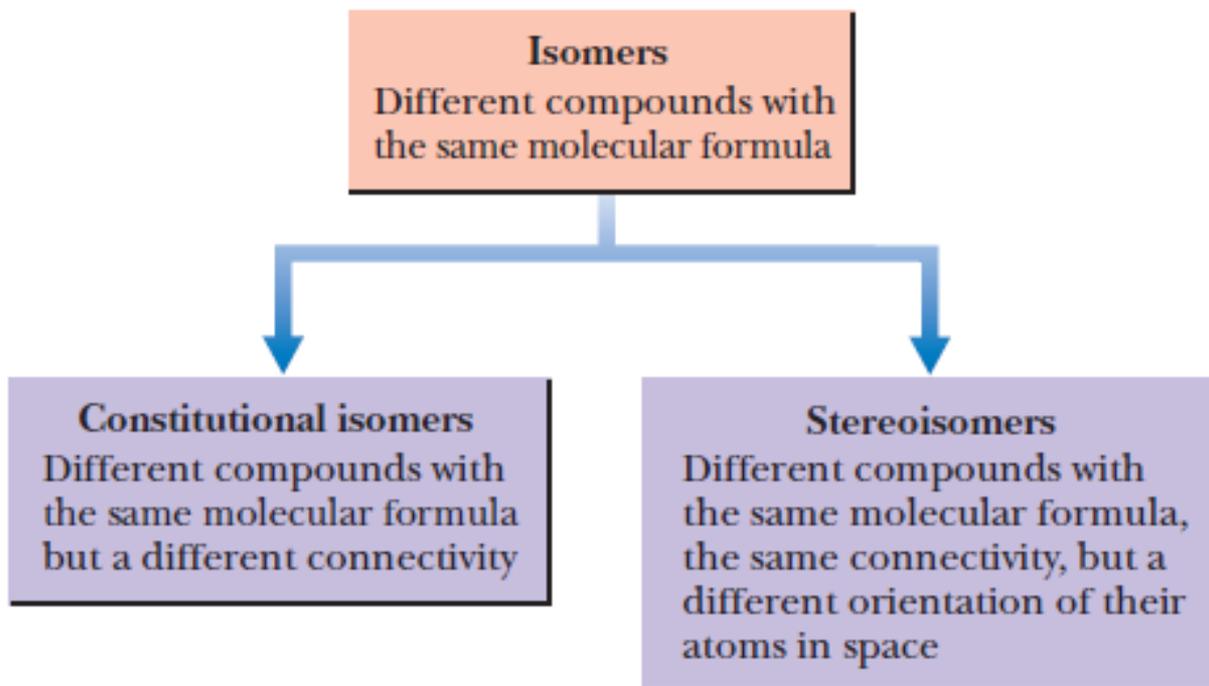
They are now eclipsed.

Conformazione dei cicloalcani



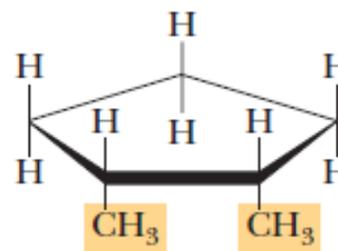
Interazione diassiale: tensione di interazione tra gruppi in posizione assiale dalla stessa parte della conformazione a sedia dell'anello del cicloesano

Isomeria *cis-trans* nei cicloalcani

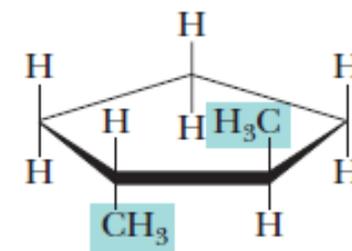


Isomeri *cis-trans*: isomeri che hanno la stessa formula molecolare e la stessa connettività degli atomi, ma diversa disposizione degli atomi nello spazio dovuta alla presenza di un anello o di un doppio legame C-C

***cis*:** dalla stessa parte
***trans*:** da parti opposte



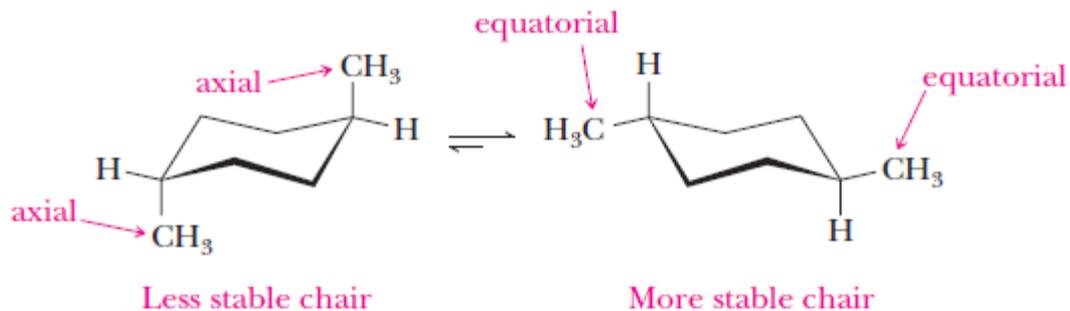
cis-1,2-Dimethylcyclopentane



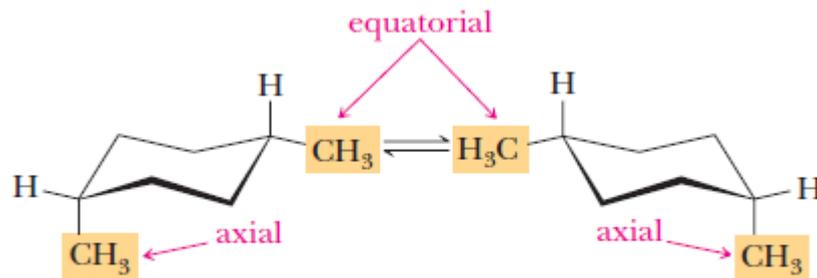
trans-1,2-Dimethylcyclopentane

Isomeria *cis-trans* nei cicloalcani

Isomeri *cis-trans*: isomeri che hanno la stessa formula molecolare e la stessa connettività degli atomi, ma diversa disposizione degli atomi nello spazio dovuta alla presenza di un anello o di un doppio legame C-C



trans-1,4-Dimethylcyclohexane



cis-1,4-Dimethylcyclohexane
(these conformations are of equal stability)

Proprietà fisiche di alcani e cicloalcani

Name	Condensed Structural Formula	Melting Point (°C)	Boiling Point (°C)	Density of Liquid* (g/mL at 0°C)
Methane	CH ₄	-182	-164	(a gas)
Ethane	CH ₃ CH ₃	-183	-88	(a gas)
Propane	CH ₃ CH ₂ CH ₃	-190	-42	(a gas)
Butane	CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₃	-138	0	(a gas)
Pentane	CH ₃ (CH ₂) ₃ CH ₃	-130	36	0.626
Hexane	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃	-95	69	0.659
Heptane	CH ₃ (CH ₂) ₅ CH ₃	-90	98	0.684
Octane	CH ₃ (CH ₂) ₆ CH ₃	-57	126	0.703
Nonane	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH ₃	-51	151	0.718
Decane	CH ₃ (CH ₂) ₈ CH ₃	-30	174	0.730

*For comparison, the density of H₂O is 1 g/mL at 4°C.

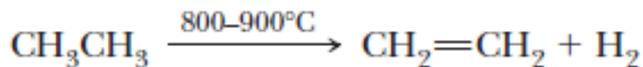
Name	Boiling Point (°C)	Melting Point (°C)	Density (g/mL)
Hexane	68.7	-95	0.659
2-Methylpentane	60.3	-154	0.653
3-Methylpentane	63.3	-118	0.664
2,3-Dimethylbutane	58.0	-129	0.661
2,2-Dimethylbutane	49.7	-98	0.649

- P.e. più bassi di altri tipi di composti con ugual peso molecolare
- P.e. e p.f. aumentano all'aumentare del peso molecolare
- Sono meno densi dell'acqua
- Gli isomeri strutturali hanno diverse proprietà chimico-fisiche
- All'aumentare delle ramificazioni, p.e. diminuisce (minore area superficiale)

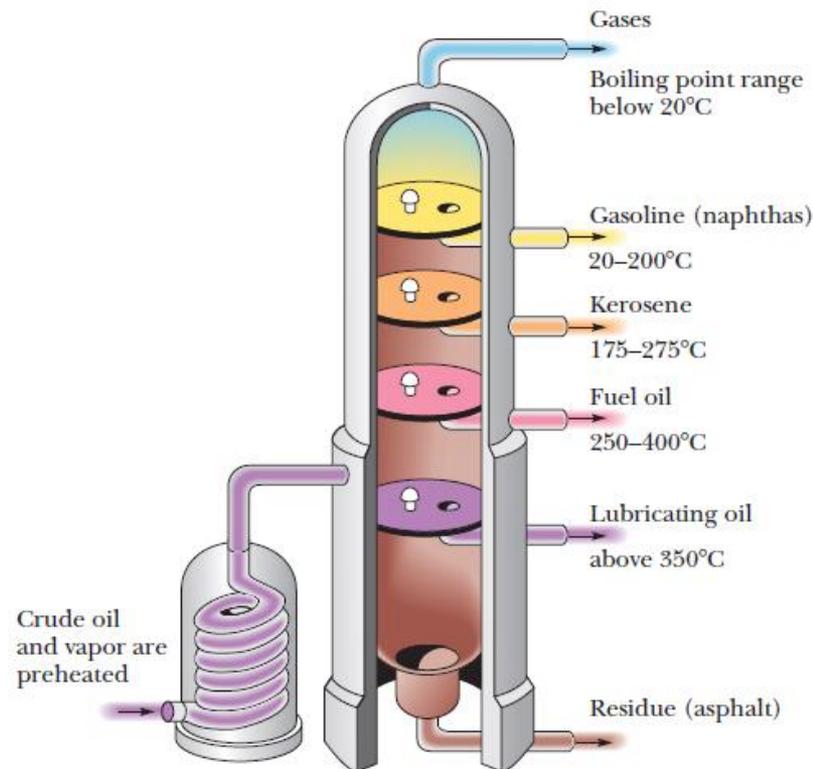
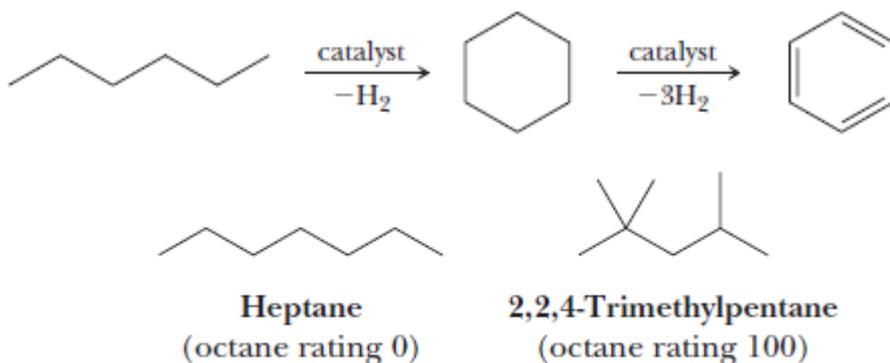
Fonti di alcani

- Petrolio
- Carbone
- Gas naturale
- Processi di separazione (es. distillazione frazionata)
- Processi di conversione (reforming)

- Cracking



- Conversione catalitica



Reazioni degli alcani

- Reazione con gli alogeni
- Reazione con l'ossigeno (ossidazione)

