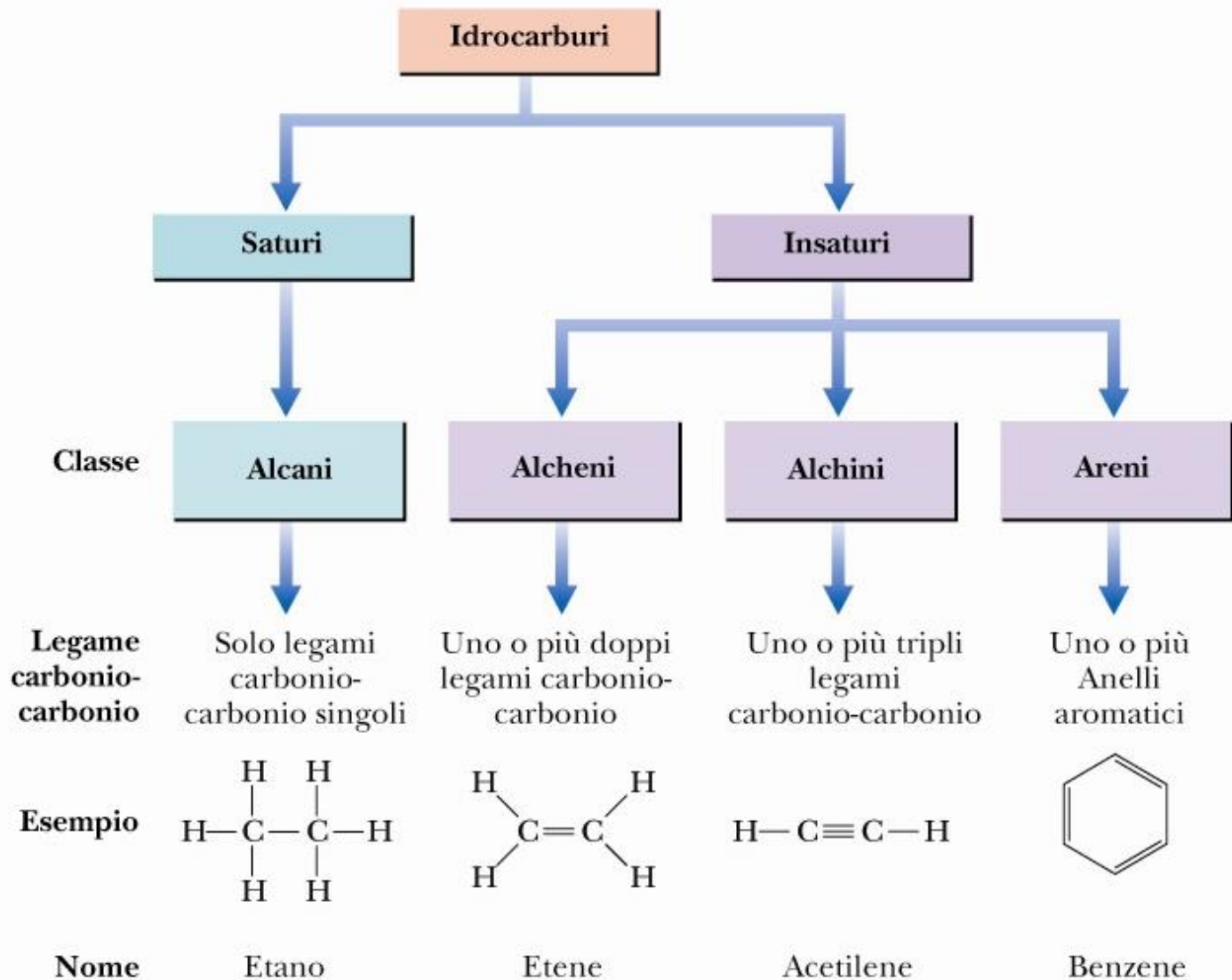


# Alcani

# Composti formati esclusivamente dagli elementi **Carbonio** ed **Idrogeno**

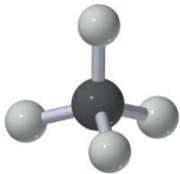
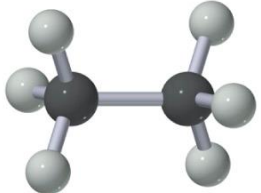
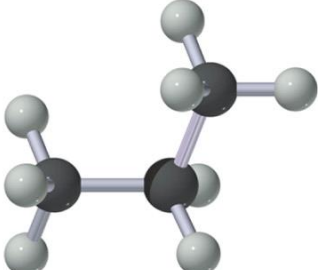
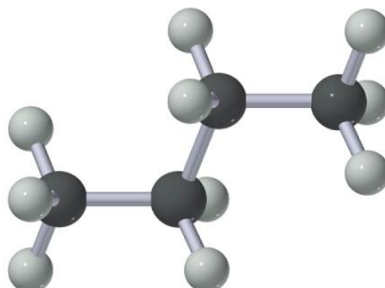


# Alcani

Sono il tipo di idrocarburi che contiene il **maggior numero di atomi di H per numero di atomi di C**

Sono anche detti **idrocarburi alifatici**

Tutti gli atomi di C sono **ibridati  $sp^3$**  ed hanno quindi **struttura tetraedrica**

nome	struttura di Lewis	struttura condensata	modello ball-and-stick
metano	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$	$\text{CH}_4$	
etano	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	$\text{CH}_3\text{CH}_3$	
propano	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$	
butano	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \quad   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \quad   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	

La loro formula generale è  **$\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$**

**E' molto comune avere a che fare con  
alcani aventi stessa formula molecolare  
ma diversa connettività**

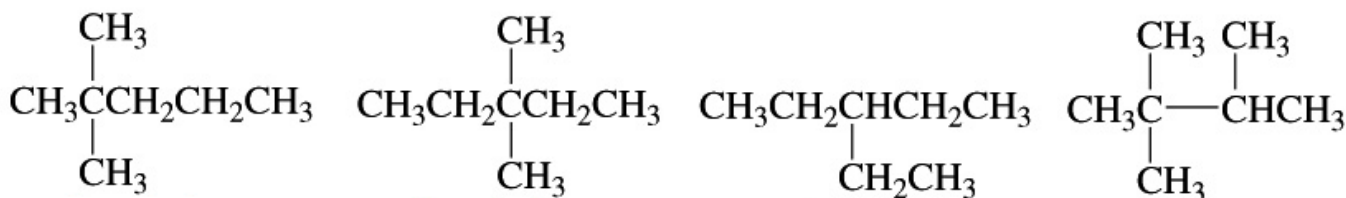
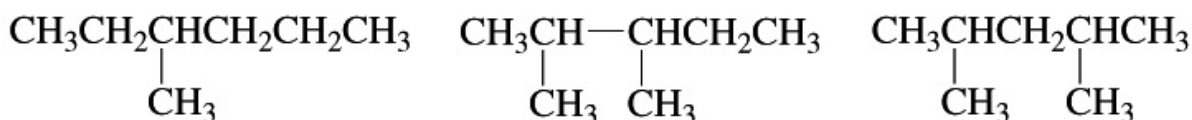
**In base a quanto già detto in precedenza, questi sono  
casi di isomeria costituzionale**

**(stessa formula molecolare ma diversa connettività)**

**Sono anche chiamati isomeri strutturali**

**Esempio:**

**C<sub>7</sub>H<sub>16</sub> isomeri strutturali (o costituzionali) dell'eptano**



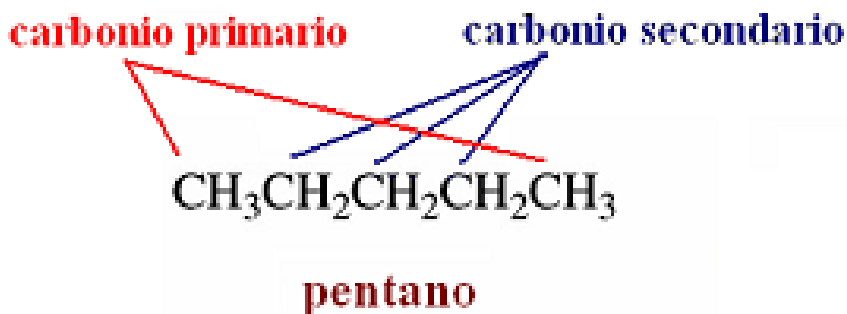
**Ricordare: gli isomeri strutturali hanno  
proprietà fisiche e chimiche diverse!!**

**Il numero di possibili isomeri  
strutturali cresce velocemente  
all'aumentare del numero di  
atomi di carbonio:**

Atomi di carbonio	Isomeri strutturali
1	1
5	3
10	75
15	4347
25	36797588
30	4111846763

# Gli atomi di carbonio di un alcano possono essere distinti in :

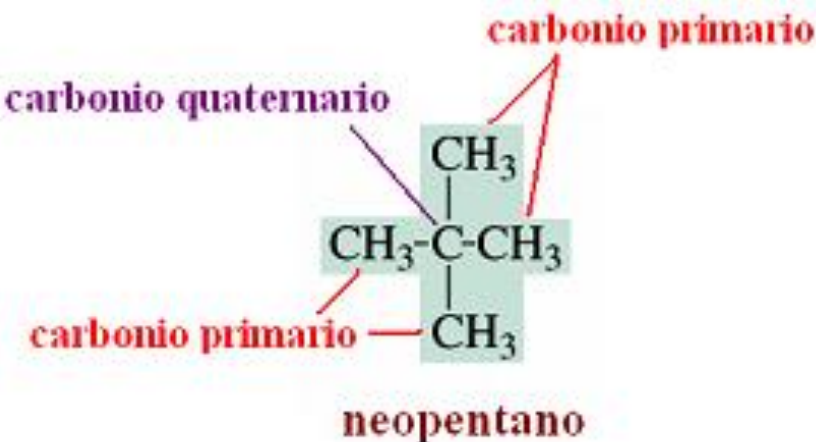
1. primari (legati ad 1 solo atomo di C)
2. secondari (legati a 2 atomi di C)
3. terziari (legati a 3 atomi di C)
4. quaternari (legati a 4 atomi di C)



Analogamente, idrogeni legati a carboni primari, secondari o terziari sono detti rispettivamente **idrogeni primari, secondari o terziari**



Nomi utilizzati per i raggruppamenti  **$\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}$**  presenti nelle formule condensate:



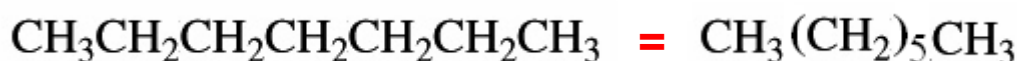
**$\text{CH}_3$**  gruppo metilico  
 **$\text{CH}_2$**  gruppo metilenico  
 **$\text{CH}$**  gruppo metinico

Tra i diversi isomeri strutturali di un alcano, quello nel quale tutti gli atomi di carbonio sono disposti a formare un'unica catena lineare è detto

“**alcano normale**” e la sua struttura condensata può essere scritta nella seguente forma generale



nella quale sono evidenziabili **2 gruppi metilici** e **n gruppi metilenici**

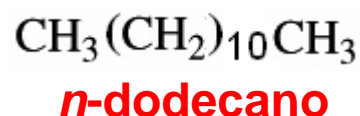
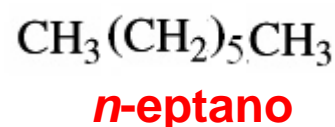
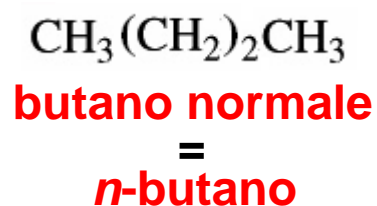


Utilizzando le regole **IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry)** il loro nome è ottenuto:

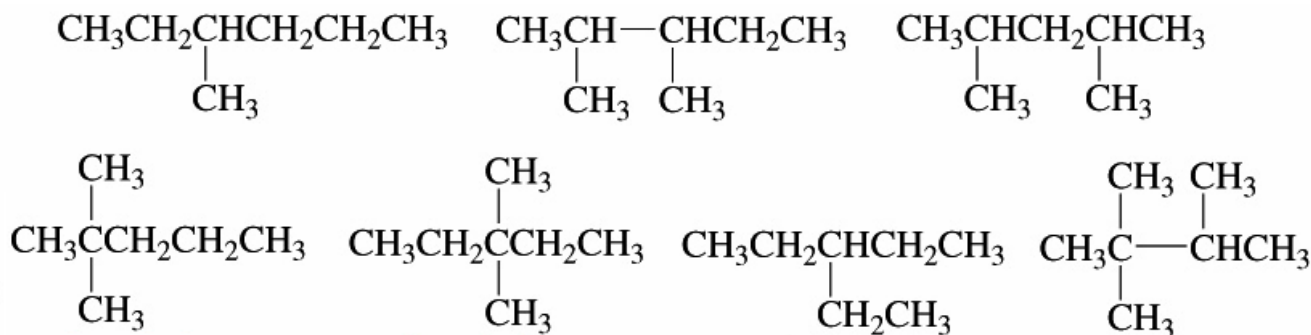
- 1. selezionando un prefisso riferito al numero di atomi di carbonio contenuti nell'alcano;**
- 2. facendo seguire al prefisso il suffisso -ano**

Prefissi usati nel sistema IUPAC per indicare la presenza in una catena non ramificata da 1 a 20 atomi di carbonio

Prefisso	Numero di atomi di carbonio	Prefisso	Numero di atomi di carbonio
met-	1	undec-	11
et-	2	dodec-	12
prop-	3	tridec-	13
but-	4	tetradec-	14
pent-	5	pentadec-	15
es-	6	esadec-	16
ept-	7	eptadec-	17
ott-	8	ottadec-	18
non-	9	nonadec-	19
dec-	10	eicos-	20



Tutti gli isomeri strutturali non lineari sono detti “**ramificati**”, perché contengono uno o più gruppi atomici (**sostituenti**) che si protraggono da una catena lineare, come i rami dal tronco di un albero.



### eptani ramificati

Un gruppo sostituito corrispondente ad un alcano privato di 1 atomo di H è genericamente detto **gruppo alchilico** e simboleggiato con **R-**

Il nome di un gruppo alchilico è ottenuto dal nome del corrispondente alcano sostituendo il suffisso **-ano** con **-ile**

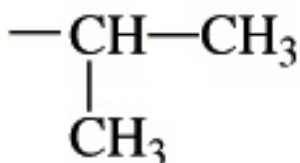
metil-	$\text{CH}_3-$	sec-butil-	$\text{CH}_3\text{CH}_2\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}-$
etil-	$\text{CH}_3\text{CH}_2-$		
propil-	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2-$		
isopropil-	$\text{CH}_3\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}-$	terz-butil-	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3\text{C}- \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$
butil-	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$	pentil-	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$
isobutil-	$\text{CH}_3\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}\text{CH}_2-$	isopentil-	$\text{CH}_3\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}\text{CH}_2\text{CH}_2-$

# Nomi comuni (nomenclatura non IUPAC)

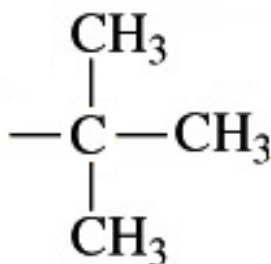
E' utilizzabile nei casi più semplici, per alcani con poche e non complesse ramificazioni.

1. Per gli alcani con più di 3 atomi di carbonio vanno usati i seguenti prefissi per indicare come termina un lato della catena:

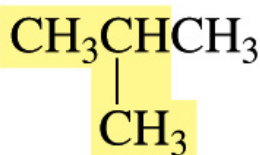
**Iso-**



**Neo-**



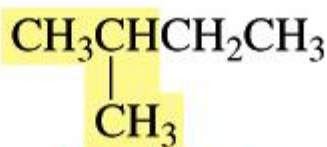
2. Indipendentemente dalla relativa disposizione, il numero totale di atomi di carbonio determina il nome (i prefissi sono quelli precedentemente elencati in tabella).



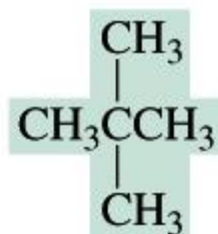
isobutano



pentano

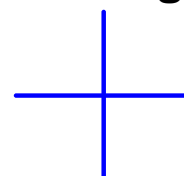
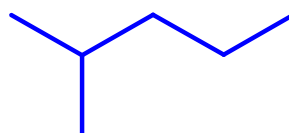
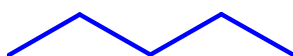
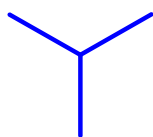


isopentano



neopentano

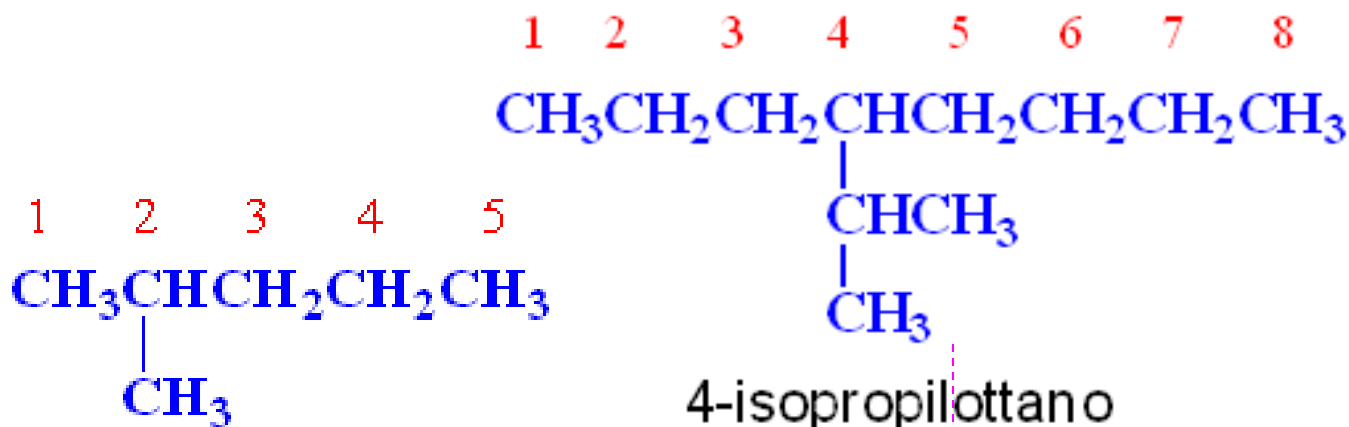
Formule **linea-angolo**: ogni **vertice** e **termine di linea** corrispondono ad un **C**, mentre **gli atomi di H sono sott'intesi**, in numero tale da completare la tetravalenza degli atomi di C







3. Ad ogni sostituente viene assegnato un nome e un numero. Il **numero** indica il **C** a cui è legato e viene collegato al nome con un trattino

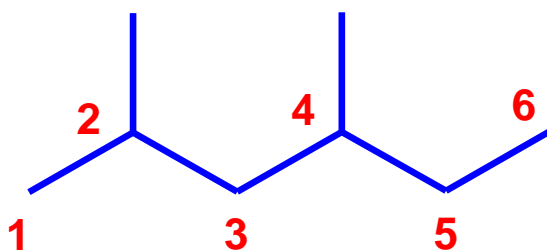


nome comune: isoesano

4. Se lo stesso sostituente compare più volte la numerazione deve essere più bassa in corrispondenza del sostituente incontrato per primo. Il numero di volte con il quale il sostituente si ripete è indicato con un prefisso:

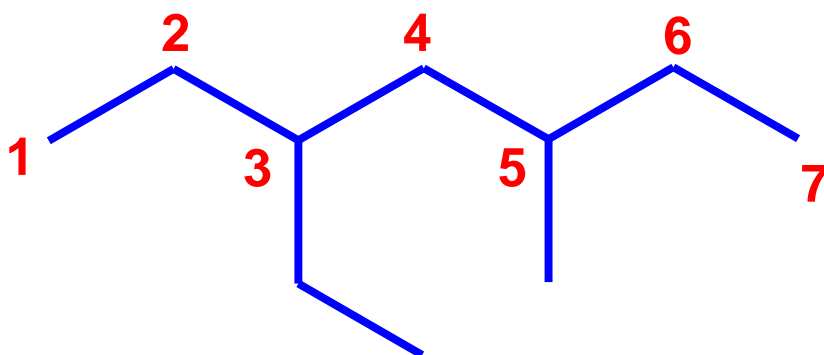
**di- tri- tetra- penta- esa- .....**

I numeri sono separati da virgole.

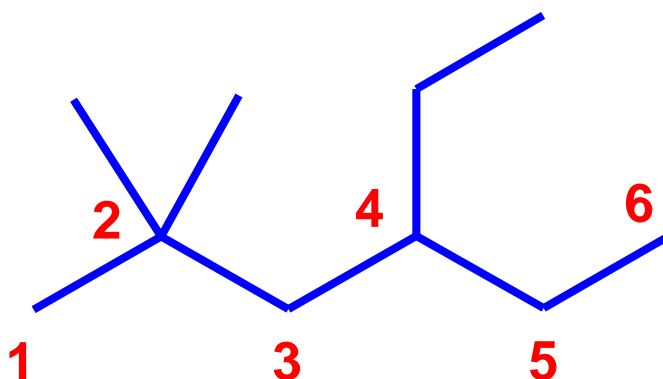


2,4-dimetilesano (non 3,5-dimetilesano)

5. Due o più sostituenti diversi tra loro sono elencati in ordine alfabetico (ma i prefissi di-, tri-, tetra- ecc. non vanno considerati ai fini di tale ordinamento). Se sono presenti sostituenti diversi in posizioni equivalenti sulla catena, il numero più basso va attribuito al sostituito che viene prima in ordine alfabetico.



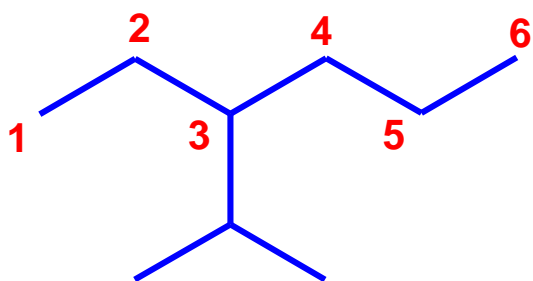
**3-Etil-5metileptano**



**4-Etil-2,2-dimetilesano**

**(non 2,2-Dimetil-4-etilesano)**

6. In caso di più catene base di identica lunghezza va scelta come catena principale quella che contiene il maggior numero di sostituenti

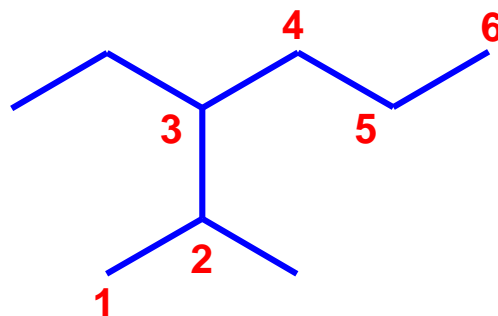


NO

(un  
sostituente)

3-Etil-2-metilesano

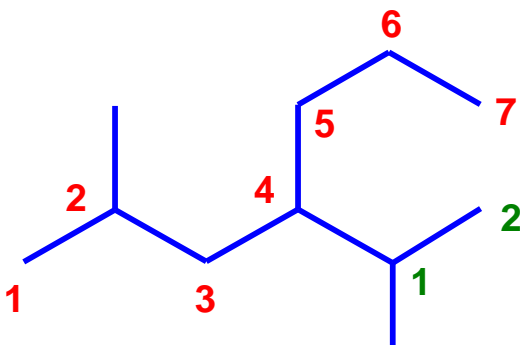
(non 3-isopropilesano)



SI

(due  
sostituenti)

7. Se un sostituente è a sua volta un alchile ramificato il suo nome andrà ricavato applicando le stesse regole appena riportate



2-metil-4-(1-metiletil)eptano

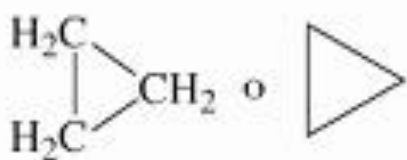
4-isopropil-2-metileptano

# Cicloalcani

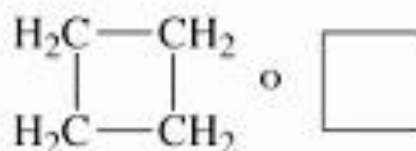
Sono idrocarburi saturi che contengono atomi di carbonio legati a ciclo

La loro formula generale è  $C_nH_{2n}$

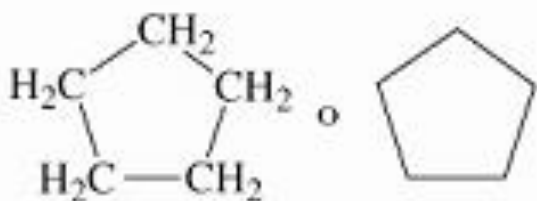
Sono comunemente rappresentati con strutture condensate o formule linea-angolo



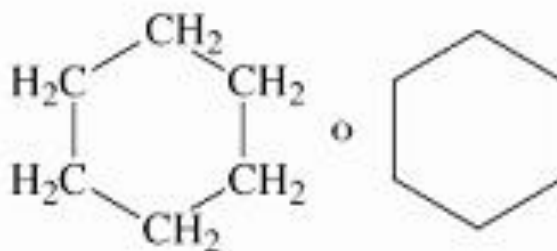
Ciclopropano  
(C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>)



Ciclobutano  
(C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>)



Ciclopentano  
(C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>)

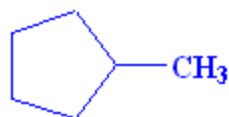


Cicloesano  
(C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>)

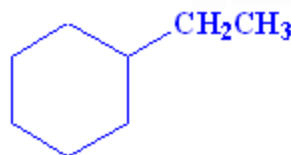
# Nomenclatura dei cicloalcani

In generale, si attribuisce facendo precedere il prefisso **ciclo-** al nome del corrispondente alcano a catena aperta ed assegnando **nome e numerazione ad ogni sostituente dell'anello**.

## 1. In caso di unico sostituente la numerazione non è necessaria

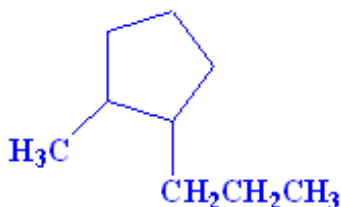


metilciclopentano

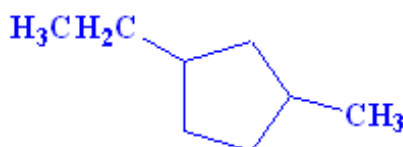


etilcicloesano

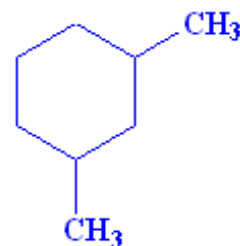
## 2. In caso di due sostituenti numerare e nominare quest'ultimi rispettando l'ordine alfabetico



1-metil-2-propilciclopentano

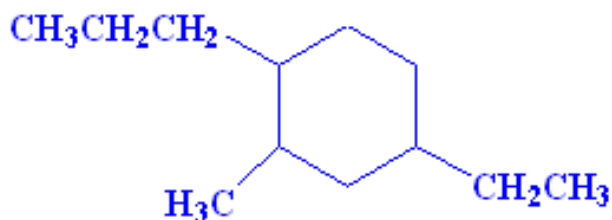


1-etil-3-metilciclopentano

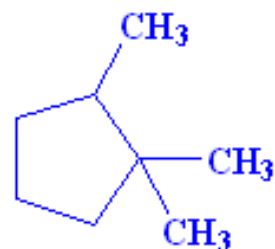


1,3-dimetilcicloesano

3. In caso di più di due sostituenti: **numerare** l'anello in modo da attribuire ai sostituenti la serie più bassa possibile, poi **nominare ed elencare** i sostituenti seguendo il criterio dell'ordine alfabetico.



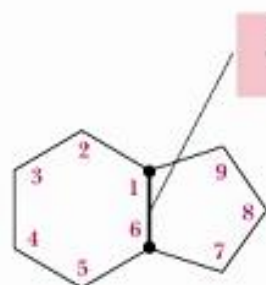
4-etil-2-metil-1-propilcicloesano



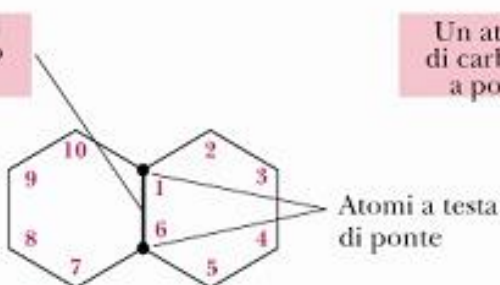
1,1,2-trimetilciclopentano

## Bicicloalcani

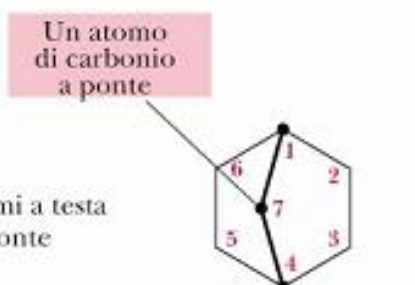
Sono alcani contenenti **2 cicli** che condividono **2 atomi di carbonio**, detti **testa di ponte**, e una **catena alchilica**.



Biciclo[4.3.0]nonano  
(Idrindano)



Biciclo[4.4.0]decano  
(Decalina)



Biciclo[2.2.1]eptano  
(Norbornano)

Zero atomi di carbonio a ponte

Un atomo di carbonio a ponte

Atomi a testa di ponte

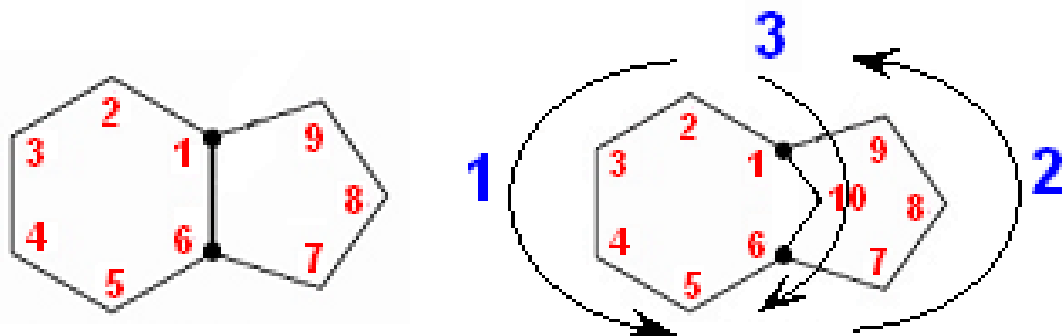
Le **3 catene alchiliche** che uniscono i due **atomi testa di ponte** sono dette **ponti**

# Nomenclatura dei biciccloalcani

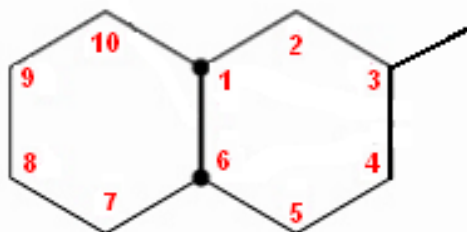
Si attribuisce facendo precedere il prefisso **biciclo-** al nome dell'alcano a catena aperta avente lo stesso numero di atomi di C ed assegnando **nome e numerazione ad ogni sostituente dell'anello.**

## Numerazione di un biciccloalcano

1. Deve partire da un atomo testa di ponte e procedere lungo la catena contenente il maggior numero di atomi di carbonio, continuando poi con lo stesso criterio fino alla numerazione completa del biciclo



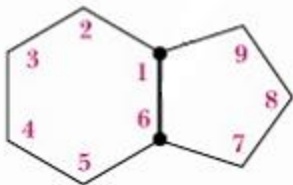
2. Se ci sono due ponti di uguale lunghezza si procede verso quello che consente di attribuire la più bassa numerazione al primo sostituente incontrato



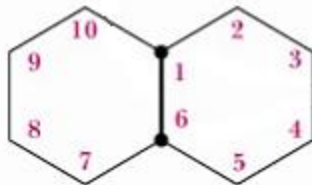


3. Per la scrittura del nome occorre :

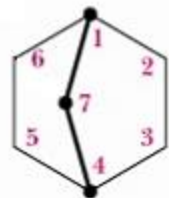
- a) riportare il prefisso **Biciclo**;
- b) aprire **parentesi quadre** dentro le quali devono essere scritte in ordine decrescente le **lunghezze dei ponti separate da un punto**;
- c) scrivere il nome base **del biciclo** considerando il numero di atomi di C contenuti nella struttura



**Biciclo[4.3.0]nonano**  
(Iridano)



**Biciclo[4.4.0]decano**  
(Decalina)

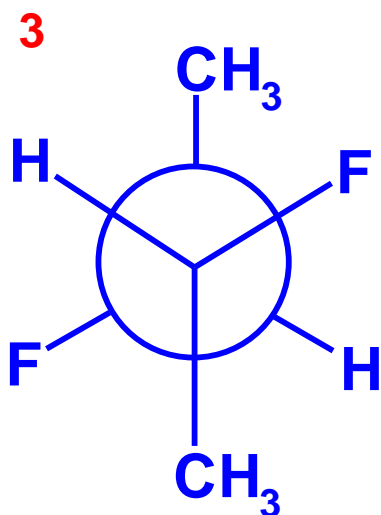
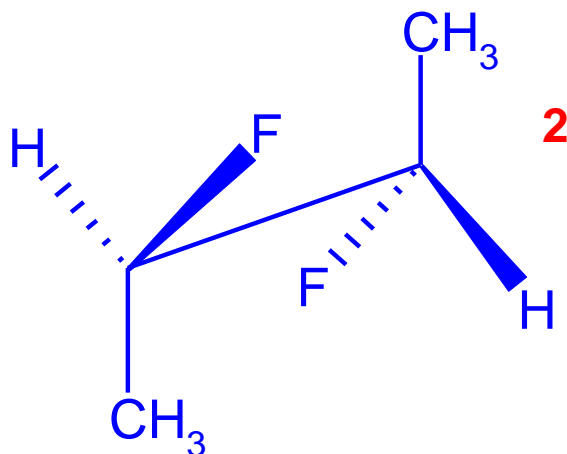
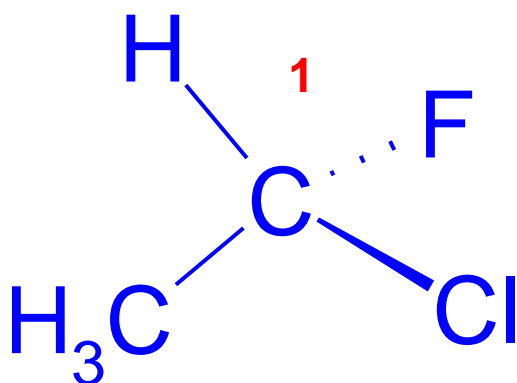


**Biciclo[2.2.1]heptano**  
(Norbornano)

# Conformazioni di alcani e cicloalcani

## Rappresentazioni 3D

1. A cunei
2. A cavalletto
3. Proiezione di Newman



# Conformazione

E' chiamata in questo modo ogni particolare disposizione tridimensionale (geometria) degli atomi di una molecola che deriva da rotazioni intorno a legami semplici. Tali geometrie sono anche dette "rotameri"

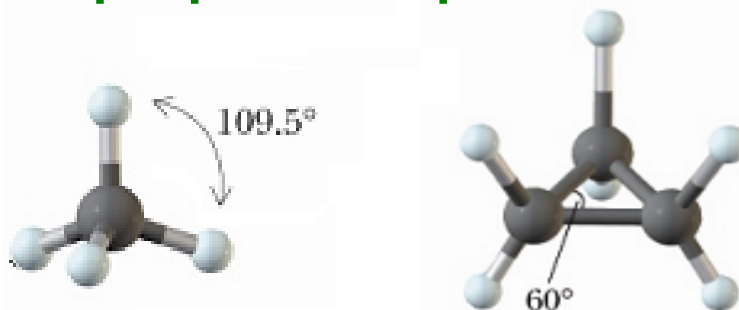
Geometrie associate a conformazioni diverse di una stessa molecola e caratterizzate da un minimo relativo dell'energia strutturale sono definite **isomeri conformazionali**, o semplicemente **conformer**, e rappresentano casi particolari di **stereoisomeria**

La diversa stabilità strutturale esistente tra le conformazioni di una molecola può essere interpretata sulla base di 3 differenti contributi:

1. **Tensione angolare**
2. **Tensione di torsione**
3. **Tensione sterica**

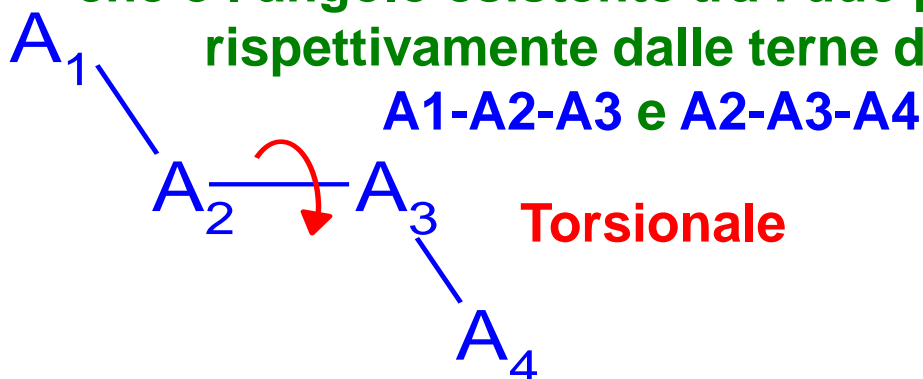
## 1. **Tensione angolare**

È un incremento di energia della molecola collegato all'esistenza di angoli di legame più grandi o più piccoli rispetto ai valori ottimali

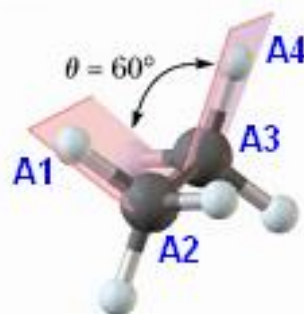
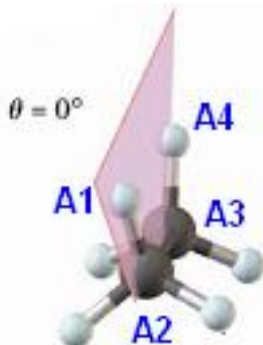
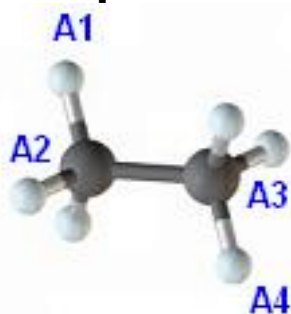


## 2. Tensione di torsione

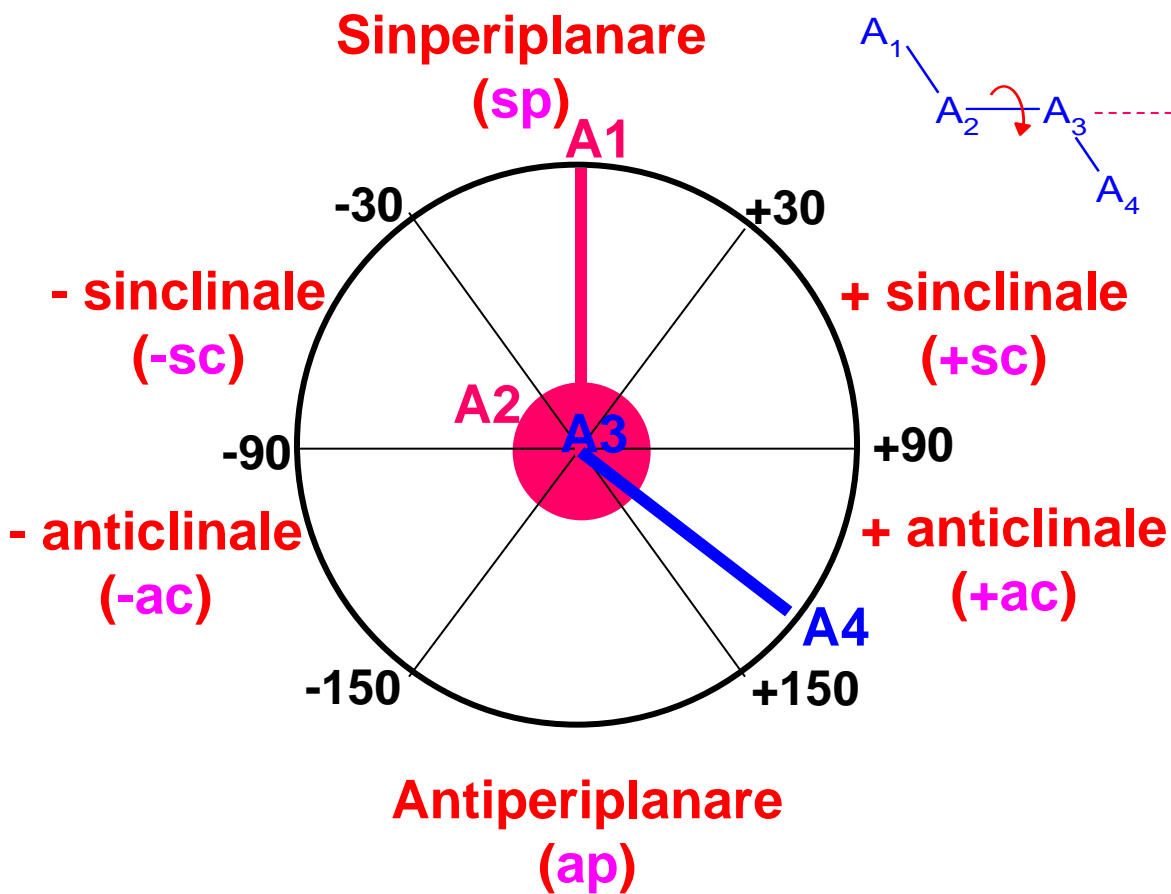
**Torsionale:** è un gruppo rappresentato da **4 atomi legati in successione**. Intorno al legame semplice esistente tra gli atomi centrali **A2** e **A3** è possibile la rotazione e pertanto ad ogni torsionale è associato un **angolo di torsione** (detto anche **angolo diedro**), che è l'angolo esistente tra i due piani definiti



Esempio: rotameri della molecola di etano



- Una disposizione con angolo diedro di **0°**, **120°** o **240°** (o prossimo a questo valore) è detta **eclissata**
- Una disposizione con angolo diedro di **60°**, **180°** o **300°** (o prossimo a questo valore) è detta **sfalsata**
- In particolare, una disposizione con angolo diedro di **0°** è anche detta **sinperiplanare**, una con angolo di **180°** è anche detta **antiperiplanare** e una con un angolo di **60°** o **300°** è anche detta **sinclinale** (+ o -, rispettivamente)



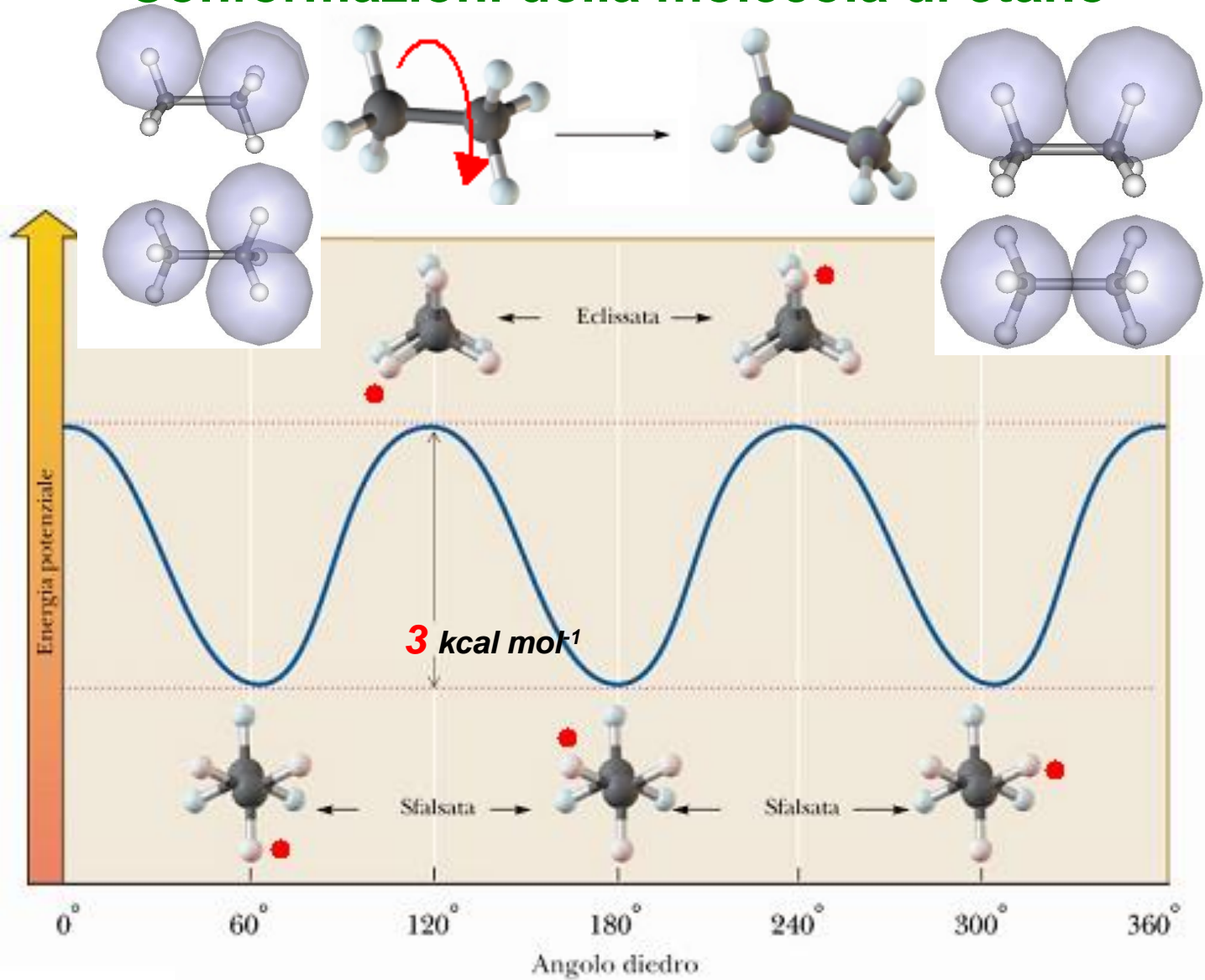
(Notazione di Klyne e Prelog)

La **tensione di torsione** (o **energia di torsione**) è la differenza di energia esistente tra la conformazione considerata e la conformazione sfalsata più vicina da raggiungere per rotazione intorno al legame centrale del torsionale. Ricordare che quest'ultima si trova ad un minimo di energia relativa.

### 3. Tensione sterica

Riguarda atomi di una molecola non legati direttamente l'uno con l'altro e separati da 4 o più legami che risultino costretti dalla particolare geometria a essere più vicini di quanto consenta il loro raggio atomico (parziale sovrapposizione delle sfere di van der Waals).

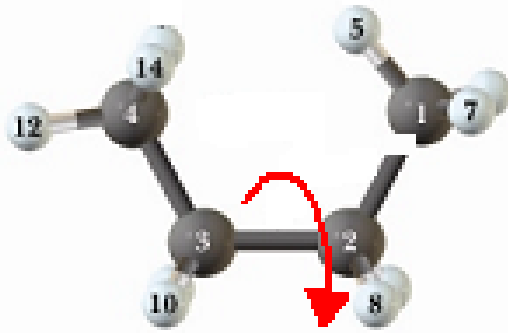
# Conformazioni della molecola di etano



**La tensione di torsione può essere imputata:**

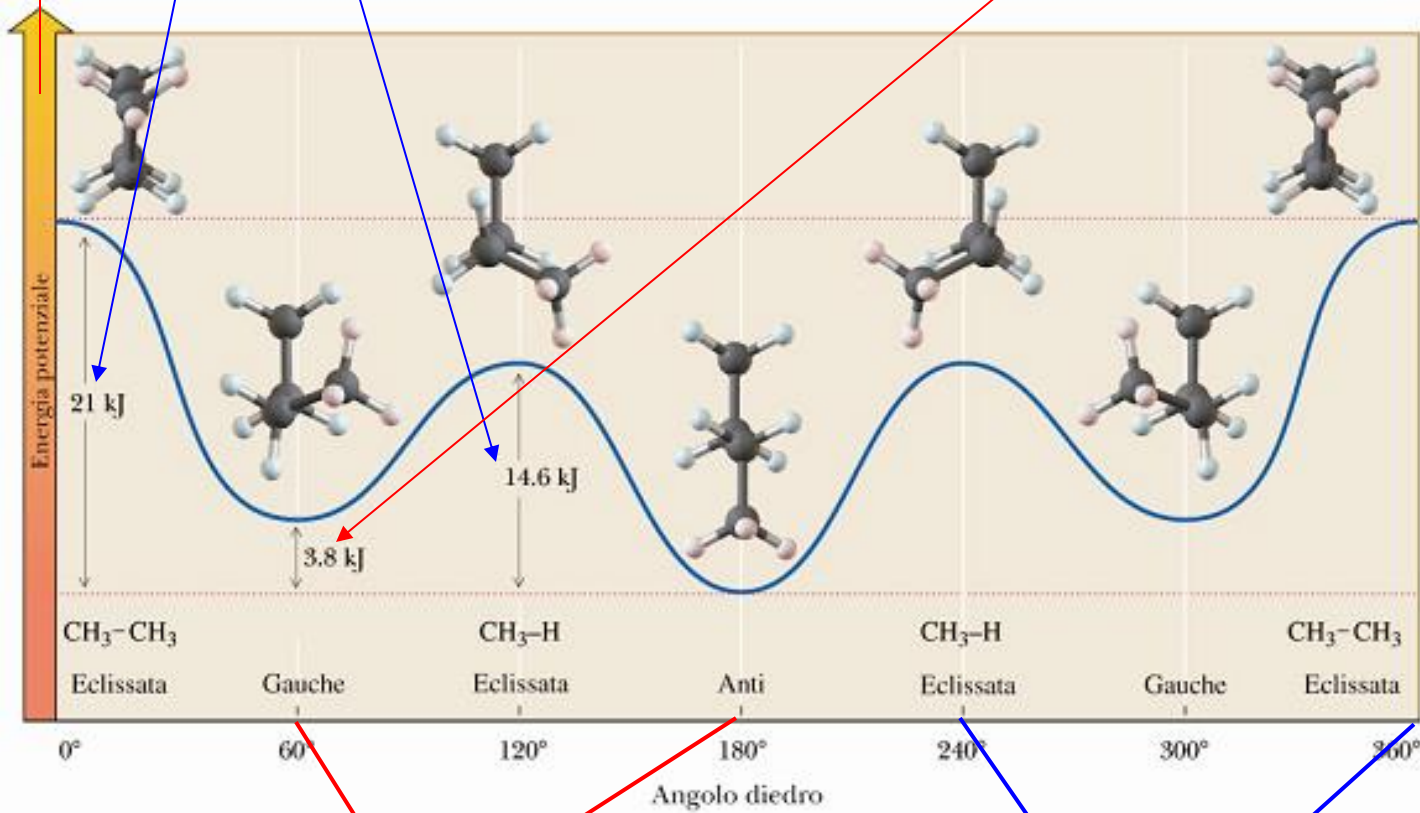
- 1. alla repulsione tra i nuclei di idrogeno nella forma eclissata;**
- 2. alla repulsione tra le nuvole di elettroni dei legami C-H adiacenti nella forma eclissata;**
- 3. alla stabilizzazione della forma sfalsata dovuta all'interazione donatore-accettore tra orbitale di legame e orbitale di antilegame di due C-H adiacenti**

# Conformazioni della molecola di butano



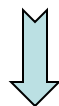
Tensione sterica  
+  
Tensione angolare

Solo poca tensione sterica



due tipi di conformazioni sfalsate

due tipi di disposizioni eclissate



Gauche o sinclinale

sinperiplanare

antiperiplanare

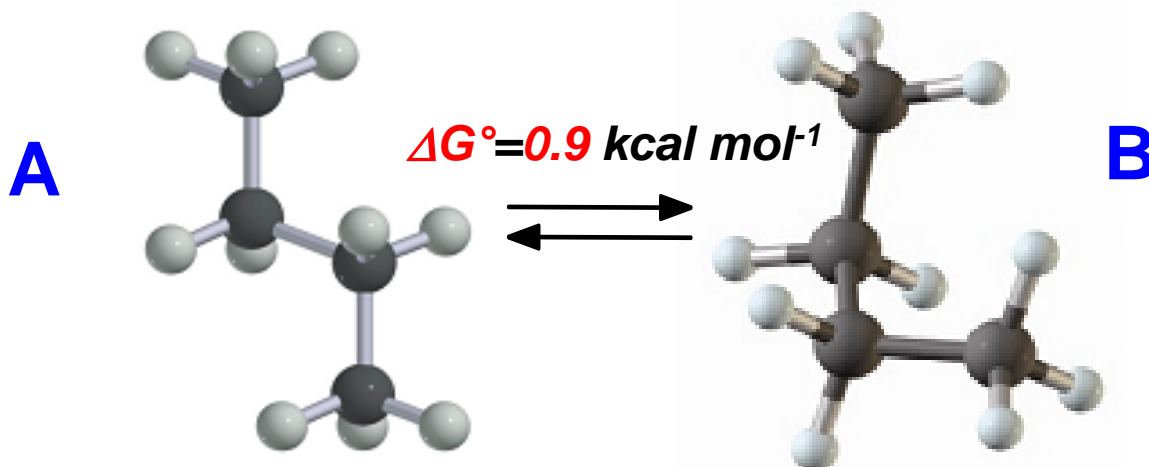
anticlinale

La stima delle popolazioni di due specie chimiche in equilibrio può essere ottenuta utilizzando la relazione termodinamica sotto riportata:

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

Che può essere riscritta nella forma

$$K_{eq} = e^{\frac{-\Delta G^\circ}{RT}} \quad \text{A } 25^\circ\text{C} \rightarrow \begin{cases} RT = 2.476 \text{ kJ mol}^{-1} \\ RT = 0.5924 \text{ kcal mol}^{-1} \end{cases}$$



Per le 2 conformazioni di minima energia della molecola di butano a  $25^\circ\text{C}$  sarà

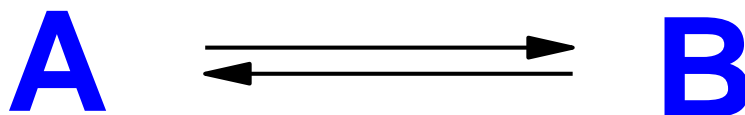
$$K_{eq} = \frac{[B]}{[A]} = 0.22 \quad \text{e quindi:}$$

$$\%B = \frac{K_{eq}}{K_{eq} + 1} \times 100 = 17.7\%$$

$$\%A = 100 - \%B = 82.3\%$$



**Costanti di equilibrio e abbondanze relative di 2 specie chimiche A e B in equilibrio alla temperatura di 25°C in funzione del  $\Delta G^\circ$  di reazione**



$\Delta G^\circ$ (kcal mol <sup>-1</sup> )	$K_{eq}$	%B	%A
0.0	1.0	50.0	50.0
-0.5	2.4	70.2	29.8
-1.0	5.6	84.8	15.2
-1.5	13.1	92.9	7.1
-2.0	31.0	96.9	3.1
-3.0	172.4	99.4	0.6
-4.0	960.1	99.9	0.1

# Conformazioni di cicloalcani

In generale, rispetto agli alcani a struttura aperta è riscontrabile un più alto contenuto energetico riportato con il termine di **“tensione d’anello”**

**tensione d’anello**

---

Ciclopropano  
Ciclobutano  
Ciclopentano



**tensione angolare**  
+  
**tensione di torsione**

Cicloesano

**non presente**

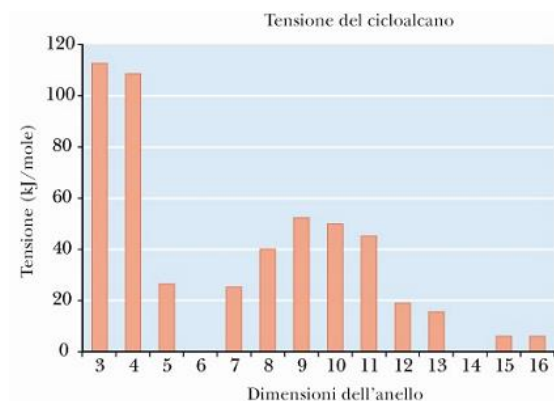
Cicloeptano

⋮

Cicloesadecano

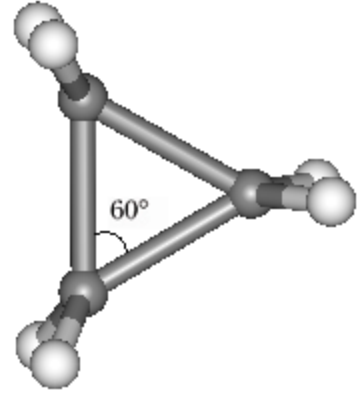
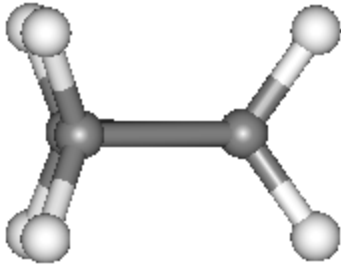


**tensione di torsione**



# Ciclopropano

**Forte tensione di torsione  
(tutti i legami C-H sono eclissati)**



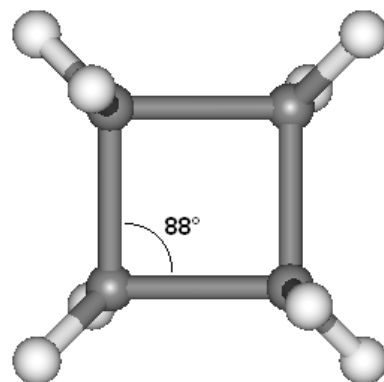
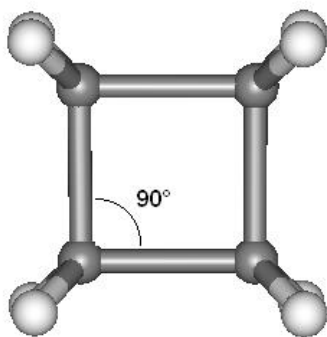
1. i legami C-H sono più corti che negli alcani
2. i legami C-C sono più lunghi che negli alcani
3. Gli angoli di legame H-C-H sono maggiori di 109.5°

**Forte tensione angolare  
(60° invece di 109.5°)**

**tensione d'anello: 27.7 kcal mol<sup>-1</sup>**

**La reattività del ciclopropano è considerevolmente più elevata rispetto a quella degli altri cicloalcani**

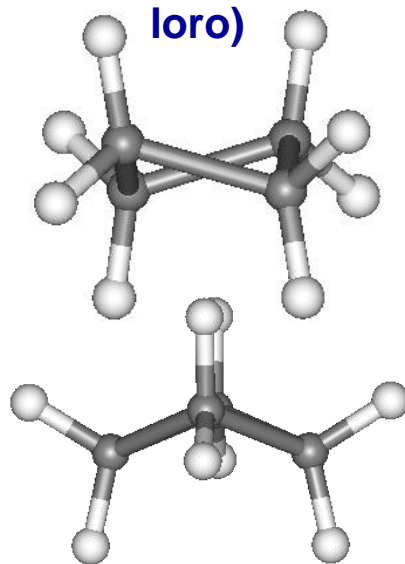
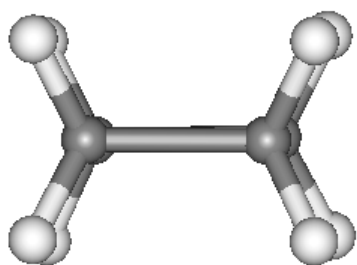
# Ciclobutano



**Forte tensione angolare  
(90° invece di 109.5°)**

**tensione angolare  
ulteriormente aggravata  
(88° invece di 109.5°)**

**Conformazioni a farfalla  
(in veloce interconversione tra di  
loro)**

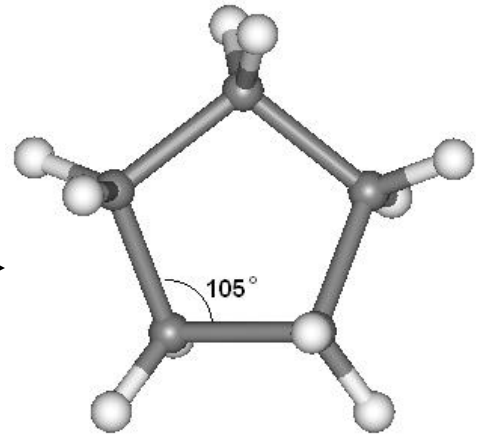
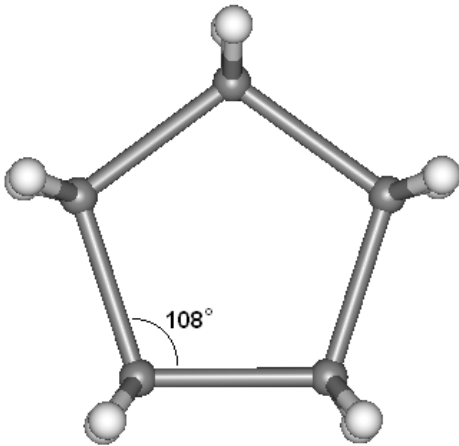


**Forte tensione di torsione  
(tutti i legami C-H sono  
eclissati)**

**tensione di torsione  
fortemente ridotta**

**tensione d'anello: 26.3 kcal mol<sup>-1</sup>**

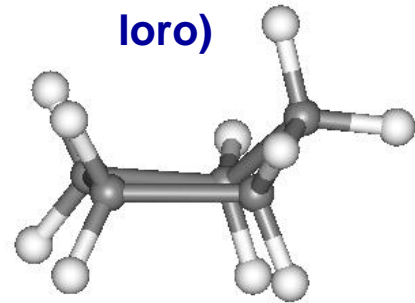
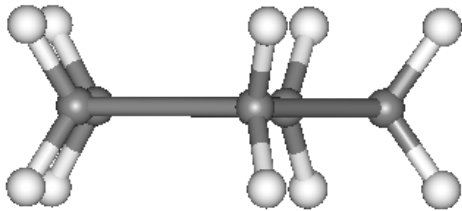
# Ciclopentano



**tensione angolare quasi nulla  
(108° invece di 109.5°)**

**tensione angolare  
leggermente aumentata  
(105° invece di 109.5°)**

**5 conformazioni a busta  
(in veloce interconversione tra di  
loro)**



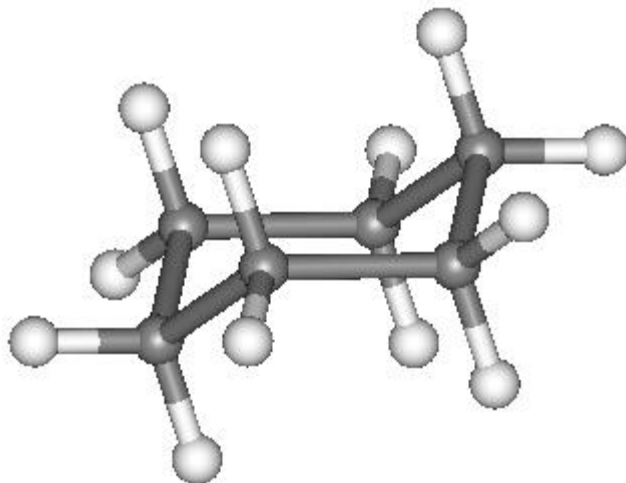
**Forte tensione di torsione  
(tutti i legami C-H sono  
eclissati)**

**tensione di torsione  
fortemente ridotta**

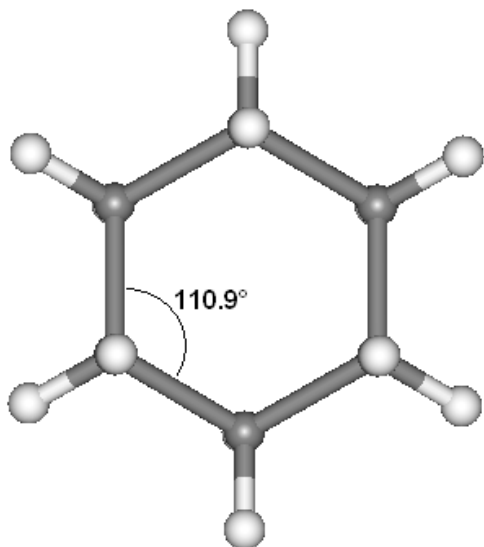
**tensione d'anello: 6.5 kcal mol<sup>-1</sup>**

# Cicloesano

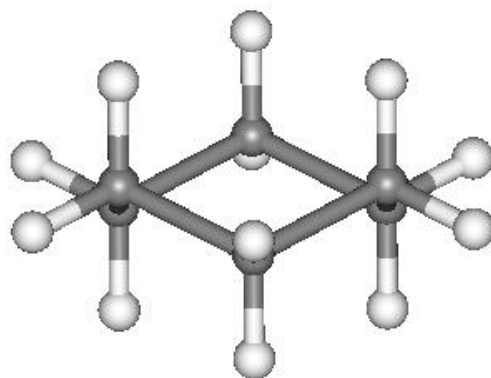
**Praticamente non è presente  
tensione d'anello!!**



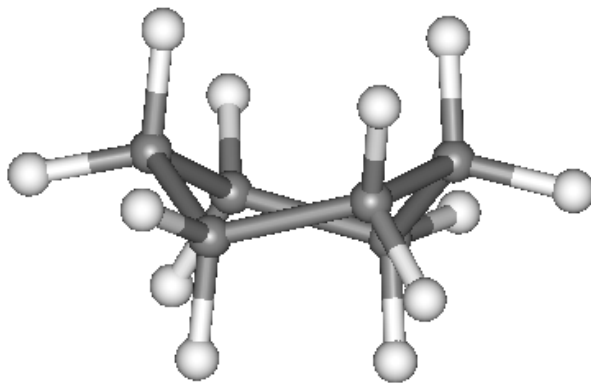
**La conformazione più stabile assunta dal  
cicloesano ricorda schematicamente la forma di  
una sedia**



**tensione angolare quasi nulla  
(110.9° invece di 109.5°)**

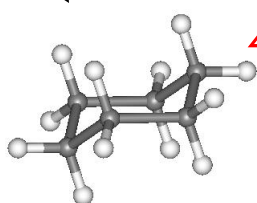
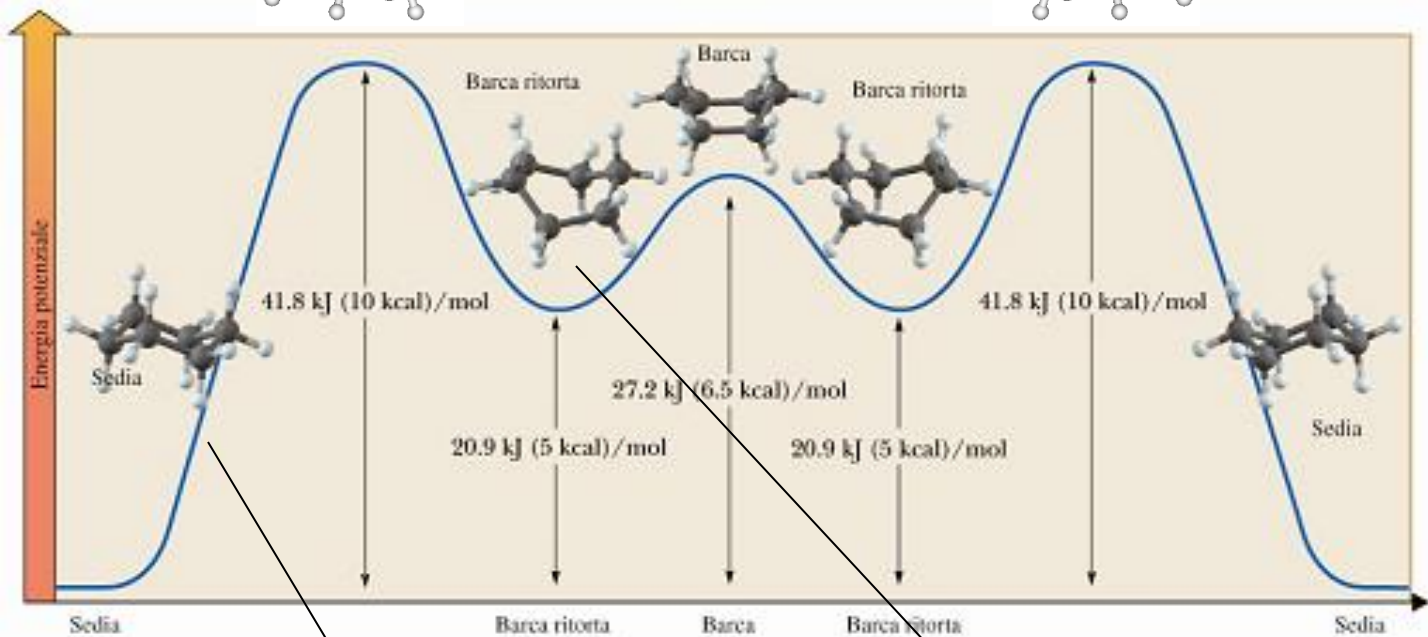
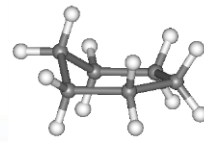
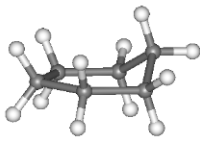


**tensione di  
torsione assente  
(tutti i legami C-H  
sono sfalsati)**



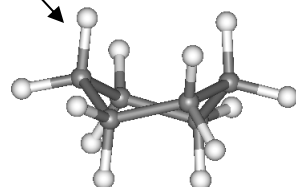
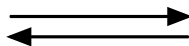
Un'altra conformazione possibile per il cicloesano è quella a “barca-ritorta”

Le diverse conformazioni possono interconvertire l'una nell'altra attraverso rotazioni intorno a legami C-C senza la necessità di superare barriere di energia troppo elevate



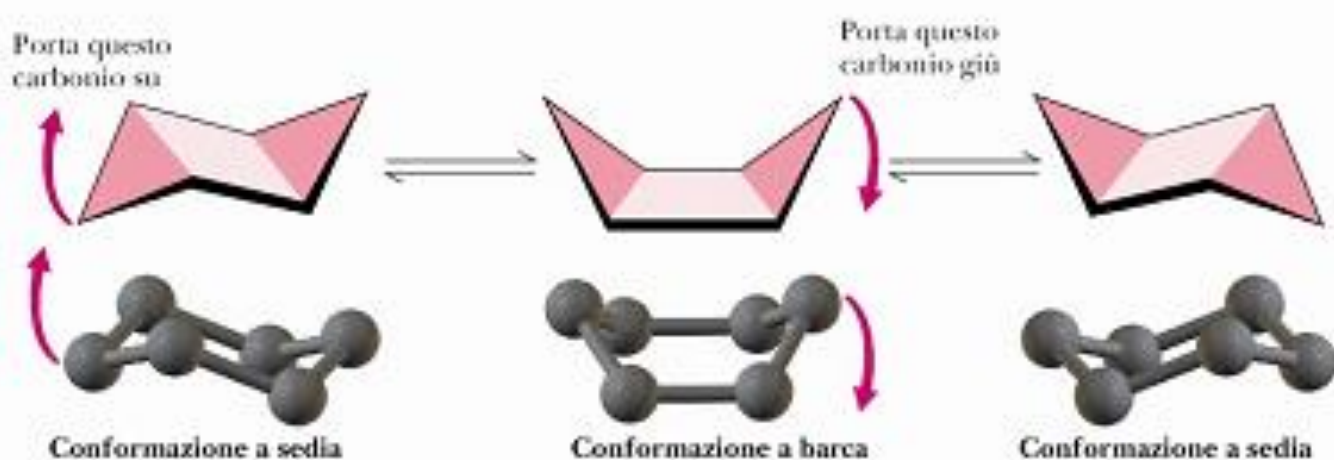
~ 100%

$$\Delta G^\circ = 5 \text{ kcal mol}^{-1}$$

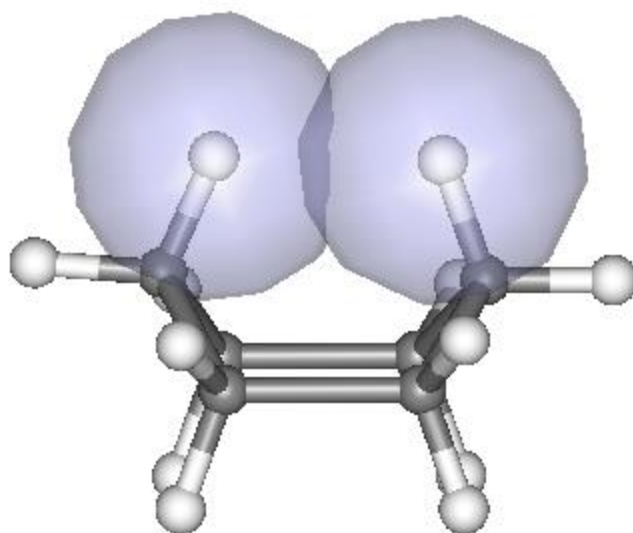


**Esistono 2 conformazioni di cicloesano a sedia in veloce interconversione tra loro**

**Il passaggio da una conformazione all'altra richiede la formazione di una geometria di massima energia, detta "a barca" a causa della sua forma**

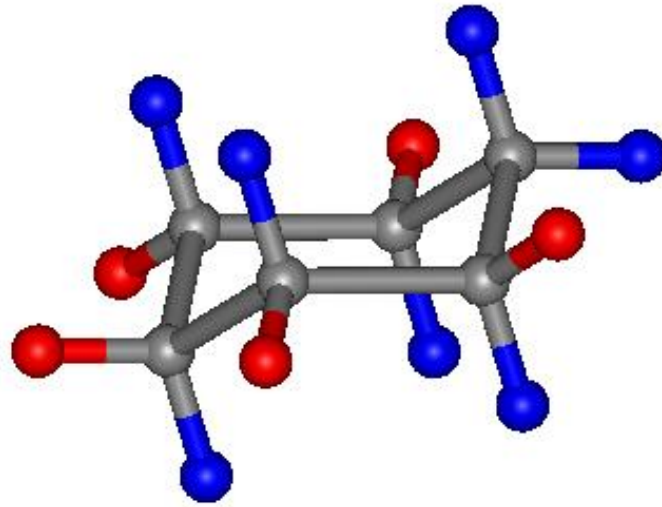


**Nella conformazione a barca 4 gruppi metilenici hanno i rispettivi legami C-H eclissati ed è presente una interazione sterica sfavorevole dovuta a due idrogeni legati ai due atomi di carbonio affacciati (idrogeni ad asta di bandiera)**

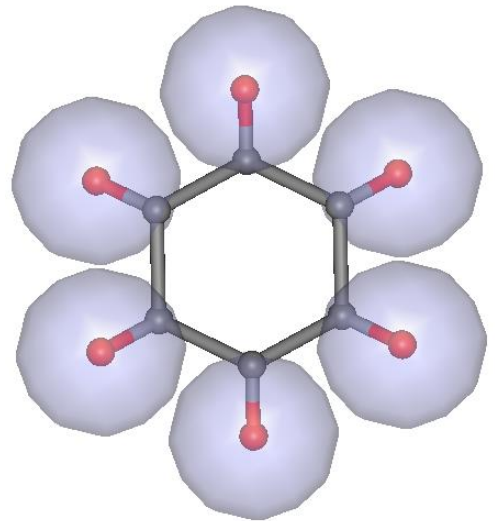
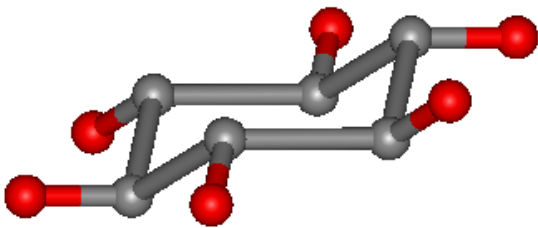




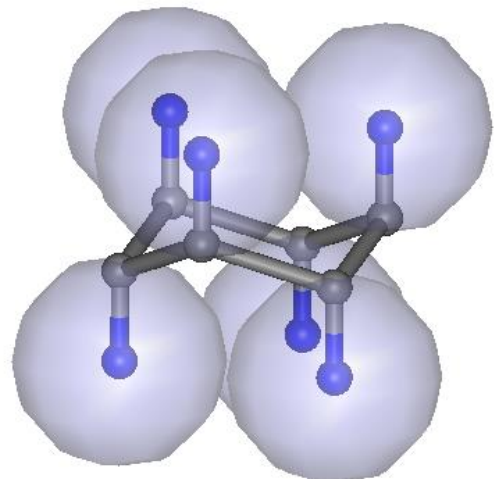
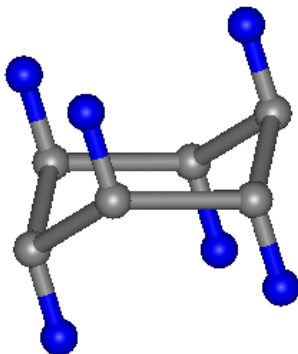
**Nella conformazione a sedia, che è praticamente l'unica ad essere popolata, sono distinguibili due tipi di atomi di idrogeno:**

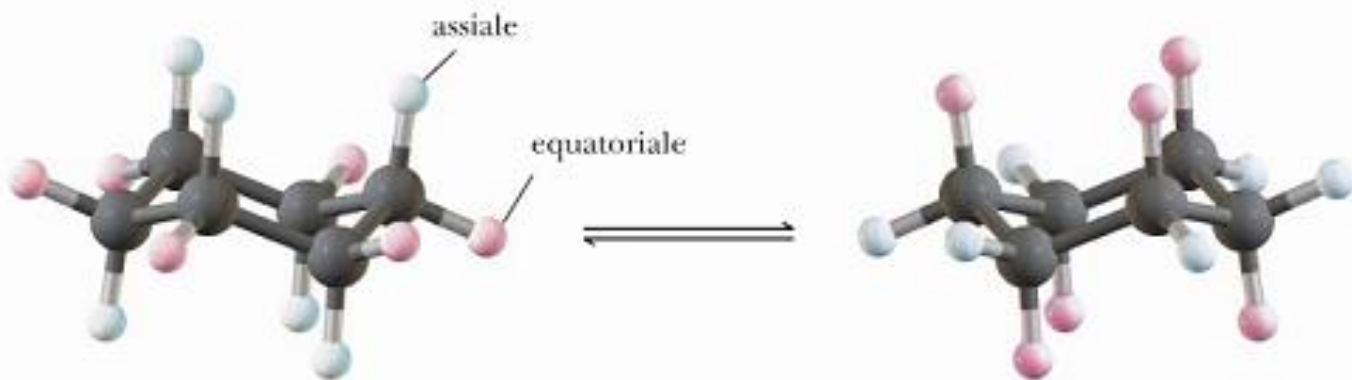


**Idrogeni equatoriali**



**Idrogeni assiali**



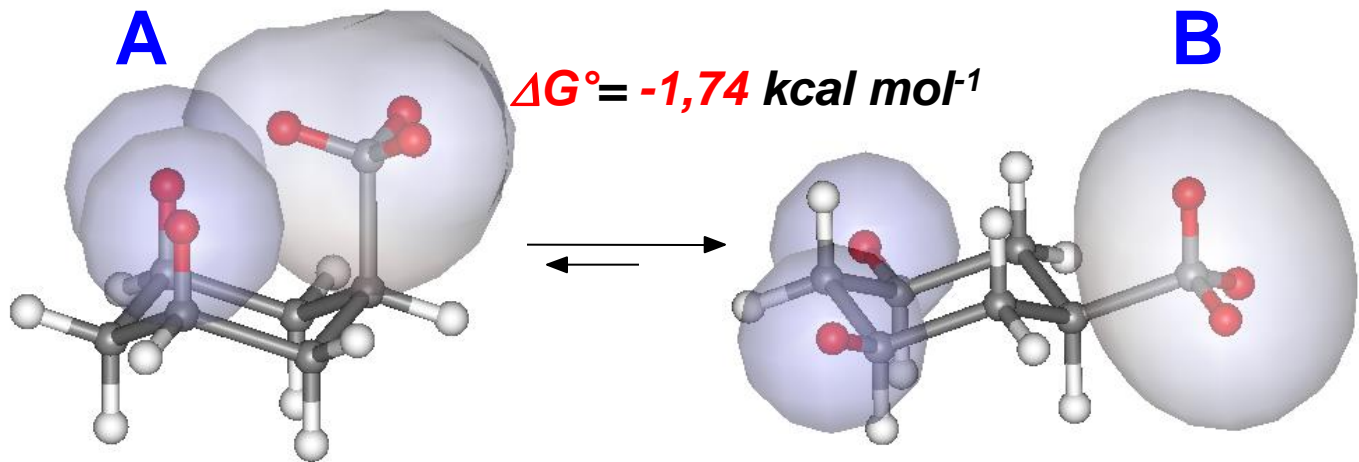


Come conseguenza dell'interconversione tra le due conformazioni a sedia, gli **idrogeni equatoriali** di una conformazione **diventano** gli **idrogeni assiali** dell'altra, e viceversa

## Cicloalcani da 7 a 16 atomi di carbonio

Grazie alla elevata mobilità conformazionale **non è presente tensione angolare**, ma è presente **tensione di torsione** per l'esistenza di **almeno una coppia di metileni** disposti con i legami **C-H eclissati**

# Cicloesani monosostituiti



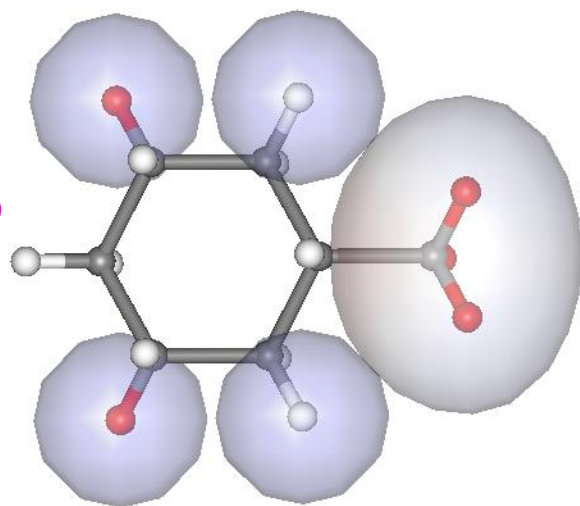
a 25°C  $K_{eq} = 18.9$

$$\%B = \frac{K_{eq}}{K_{eq} + 1} \times 100 = 95\%$$

$$\%A = 5\%$$

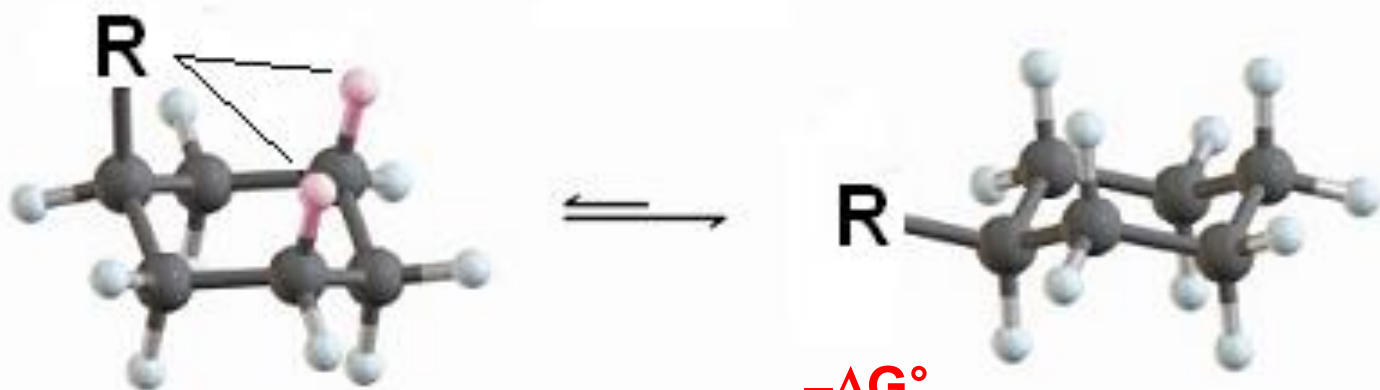
Gli stereoisomeri derivanti

dall'interconversione delle due conformazioni a sedia di un cicloesano monosostituito hanno certamente una diversa stabilità energetica per l'esistenza, solo in una delle due geometrie, di interazioni 1-3 e 1-5 diassiali (cioè forme di tensione sterica)



Interazioni diassiali





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

$\Delta G^\circ$  fra sostituenti assiali ed equatoriali in cicloesani monosostituiti a 25°C

assiale → equatoriale

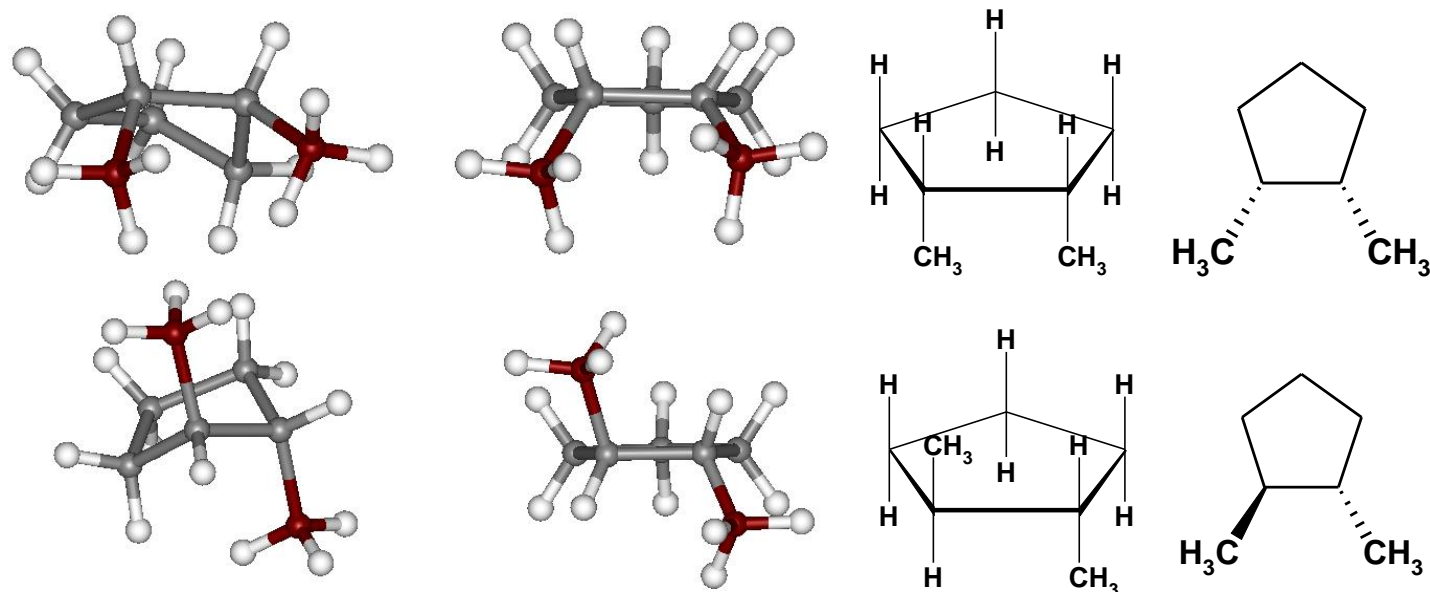
R Gruppo	$-\Delta G^\circ$		R Gruppo	$-\Delta G^\circ$	
	kJ/mole	kcal/mole		kJ/mole	kcal/mole
C≡N	0.8	0.19	NH <sub>2</sub>	5.9	1.41
F	1.0	0.24	CO <sub>2</sub> H	5.9	1.41
C=CH	1.7	0.41	CH=CH <sub>2</sub>	7.1	1.70
I	1.9	0.45	CH <sub>3</sub>	7.28	1.74
Cl	2.2	0.53	CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	7.3	1.75
Br	2.4	0.57	CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	9.0	2.15
OH	3.9	0.93	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	21.0	5.00

Solo il **gruppo** terz-butilico è così ingombrante da determinare, in pratica, l'esistenza del **solo** isomero con il gruppo in equatoriale

# Isomeria cis-trans nei **Cicloalcani** **di- o poli- sostituiti**

I **cicloalcani con 2 o più sostituenti** mostrano un **tipo di stereoisomeria denominata cis-trans**

**cis-1,2-dimetilciclopentano**



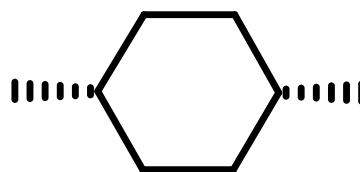
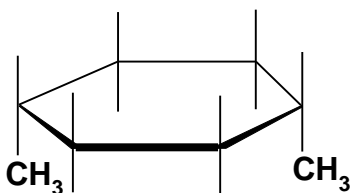
**trans-1,2-dimetilciclopentano**

**cis** : **sostituenti dalla stessa parte**  
(rispetto al piano del ciclo)

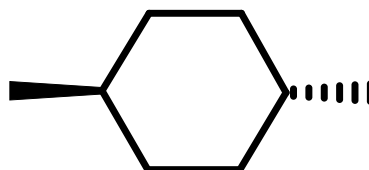
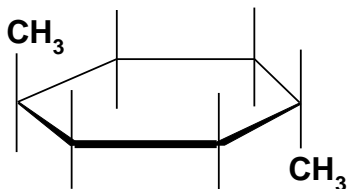
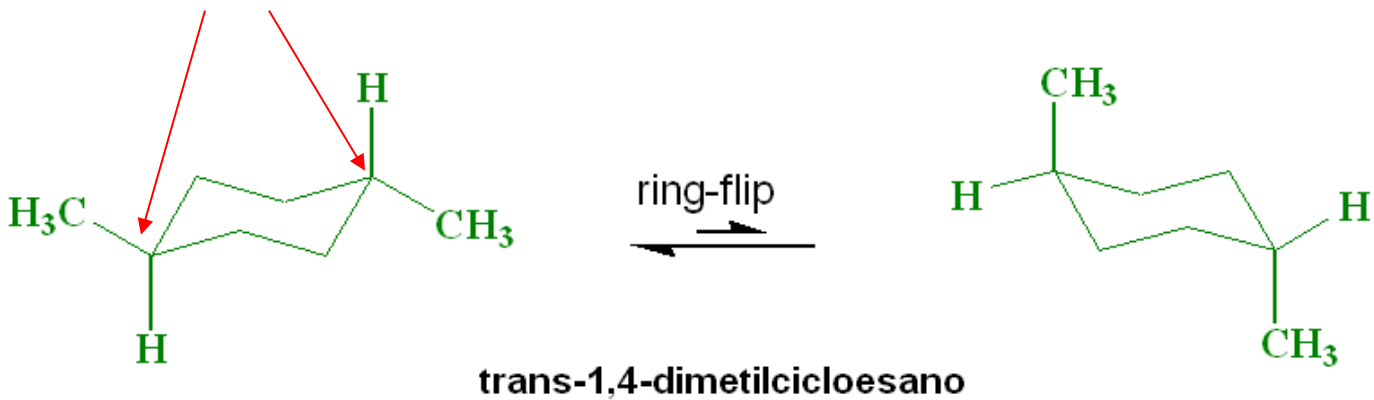
**trans** : **sostituenti da parti opposte**  
(rispetto al piano del ciclo)

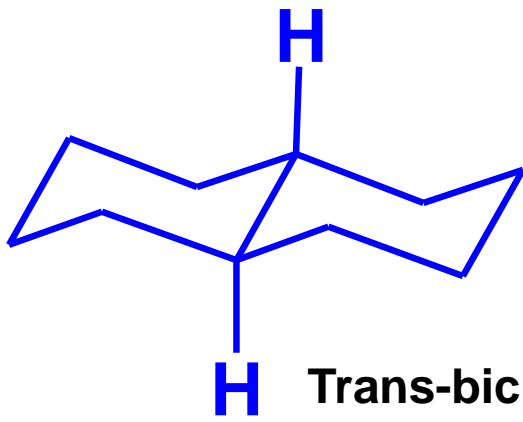
In questi cicloalcani gli atomi di carbonio portatori dei sostituenti sono detti “ **atomi (o centri) stereogenici** “ perché ogni interscambio di **2 loro ligandi** porta alla formazione di **uno stereoisomero**

**stereocentri**

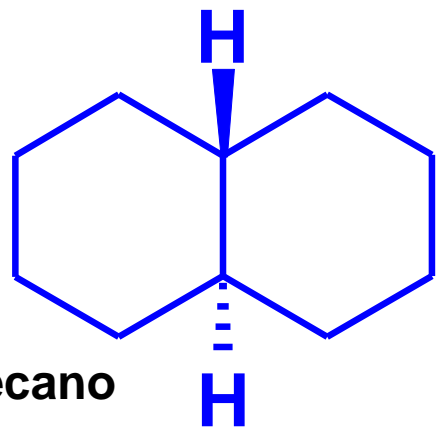


**stereocentri**

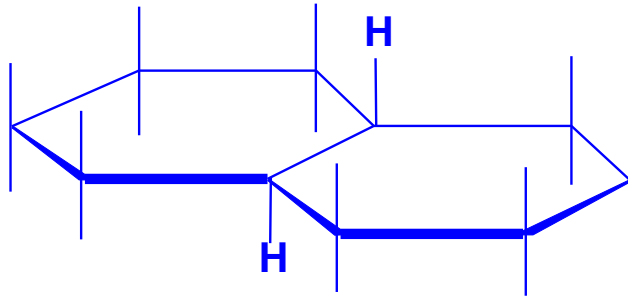




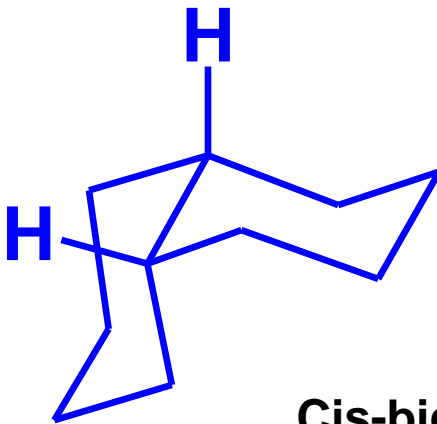
**Trans-biciclo[4,4,0]decano**



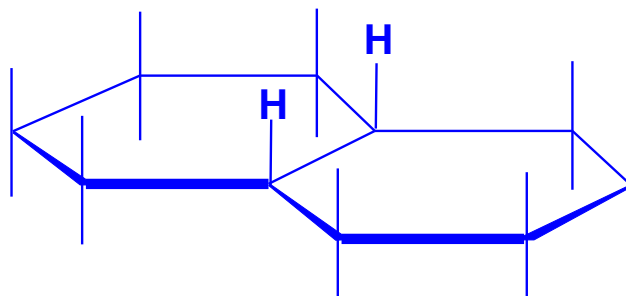
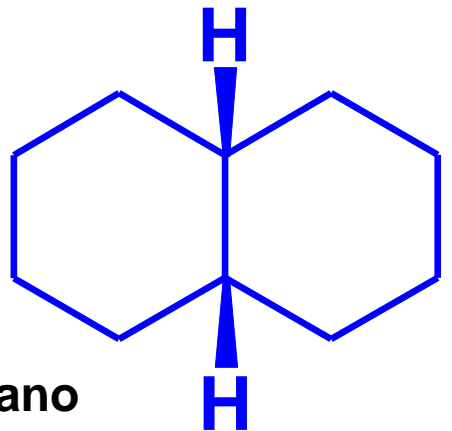
**Trans-decalina**



**Cis-biciclo[4,4,0]decano**



**Cis-decalina**



# Proprietà fisiche di alcani e cicloalcani

Proprietà fisiche di alcuni alcani lineari

Nome	Formula di struttura condensata	p.f. (°C)	p.e. (°C)	Densità del liquido* (g/mL a 0°C)
Metano	CH <sub>4</sub>	-182	-164	(un gas)
Etano	CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	-183	-88	(un gas)
Propano	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-190	-42	(un gas)
Butano	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-138	0	(un gas)
Pentano	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	-130	36	0.626
Esano	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> CH <sub>3</sub>	-95	69	0.659
Eptano	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CH <sub>3</sub>	-90	98	0.684
Ottano	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>6</sub> CH <sub>3</sub>	-57	126	0.703
Nonano	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CH <sub>3</sub>	-51	151	0.718
Decano	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> CH <sub>3</sub>	-30	174	0.730

**I punti di fusione, di ebollizione e le densità crescono con le dimensioni delle molecole di alcano, ma, a parità di dimensioni molecolari, sono comunque più piccoli di quelli caratteristici di altre specie molecolari contenenti legami polarizzati**

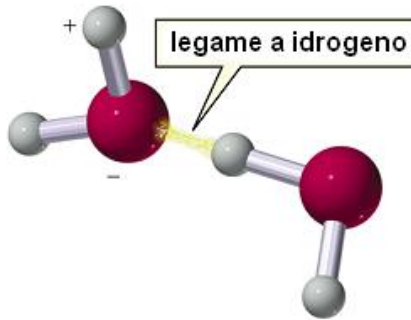
**Bassi valori dei punti di fusione e di ebollizione sono indicativi di deboli legami intermolecolari**



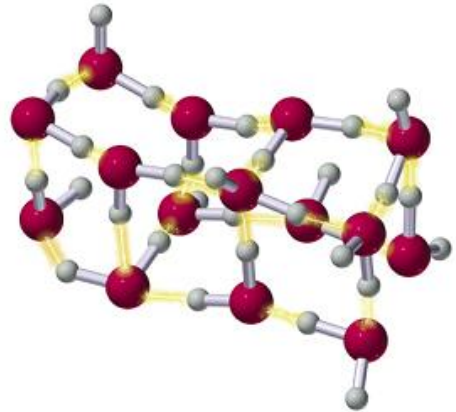
# legami intermolecolari

Forza delle interazioni

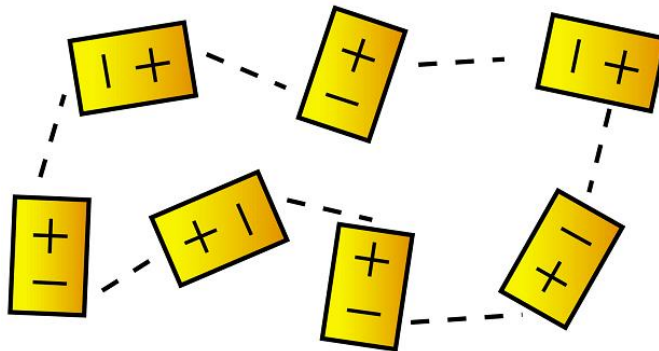
## legami a idrogeno



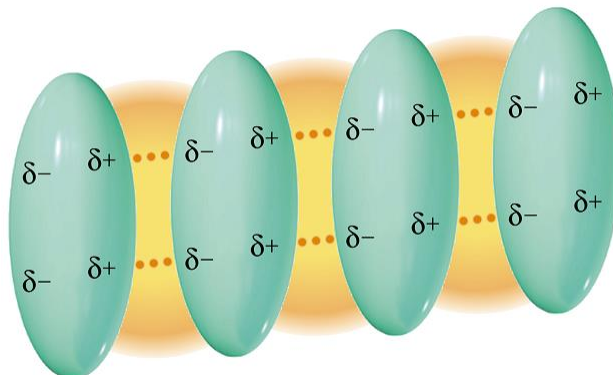
legame a idrogeno in acqua



## interazioni dipolo-dipolo

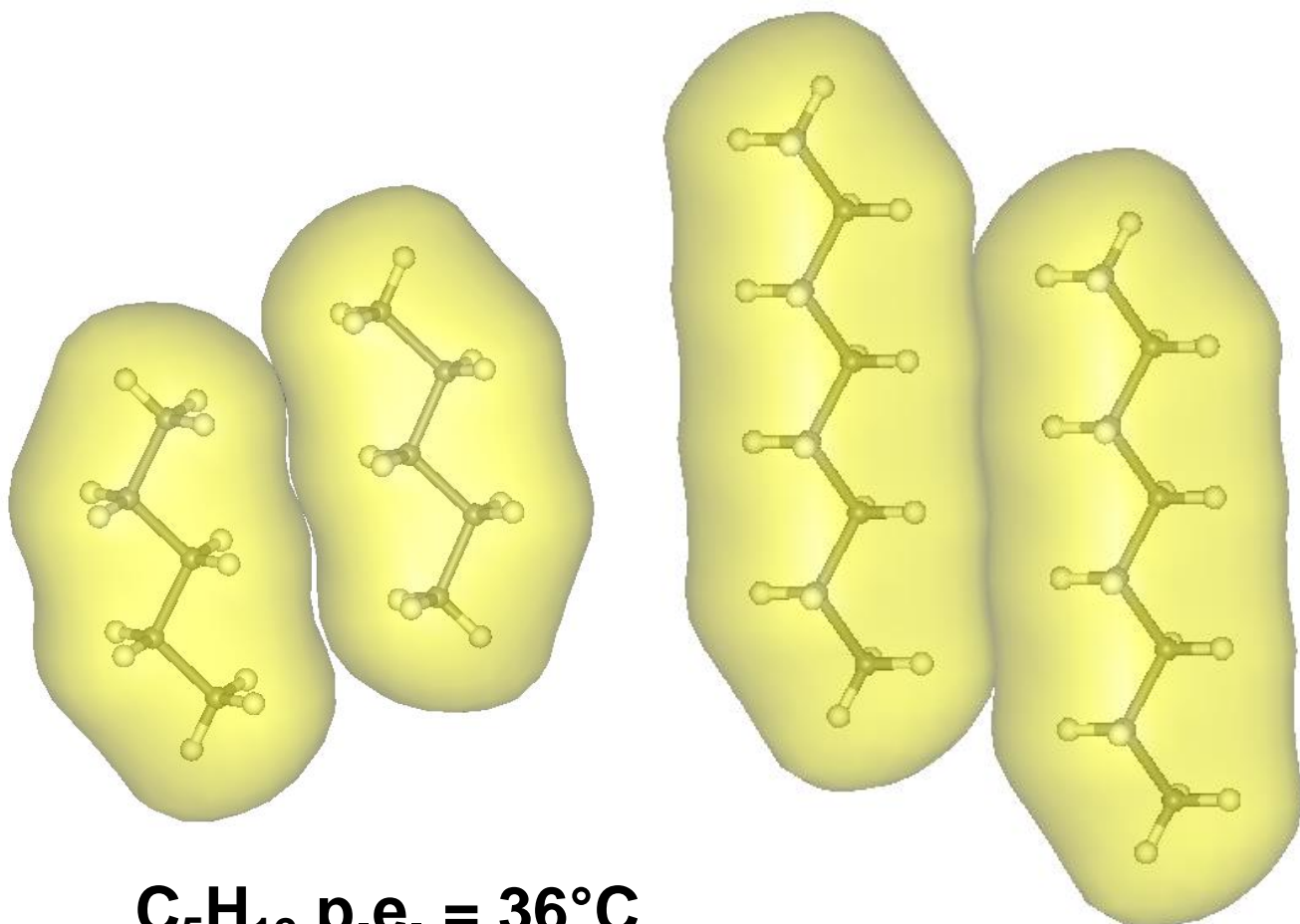


## interazioni di van der Waals (forze di dispersione)



Uniche  
interazioni  
possibili tra  
molecole di  
alcano!!

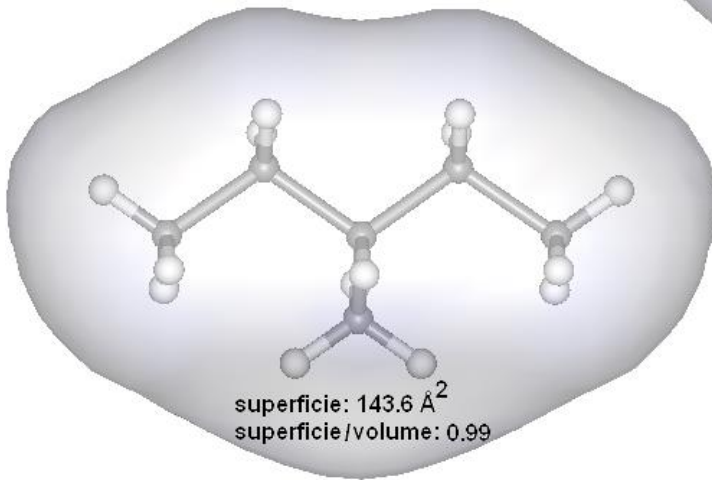
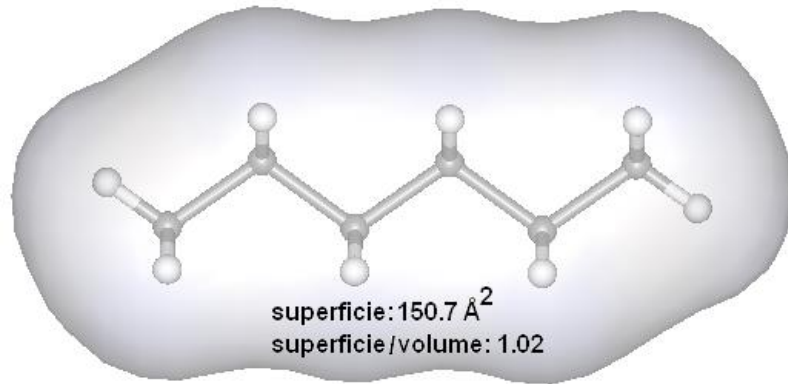
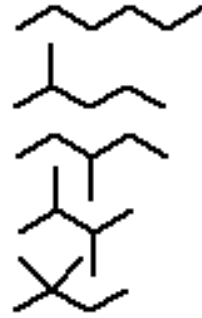
Le interazioni di van der Waals diventano più intense all'aumentare della **superficie esposta dalle molecole** (superficie di contatto esistente tra molecola e molecola).



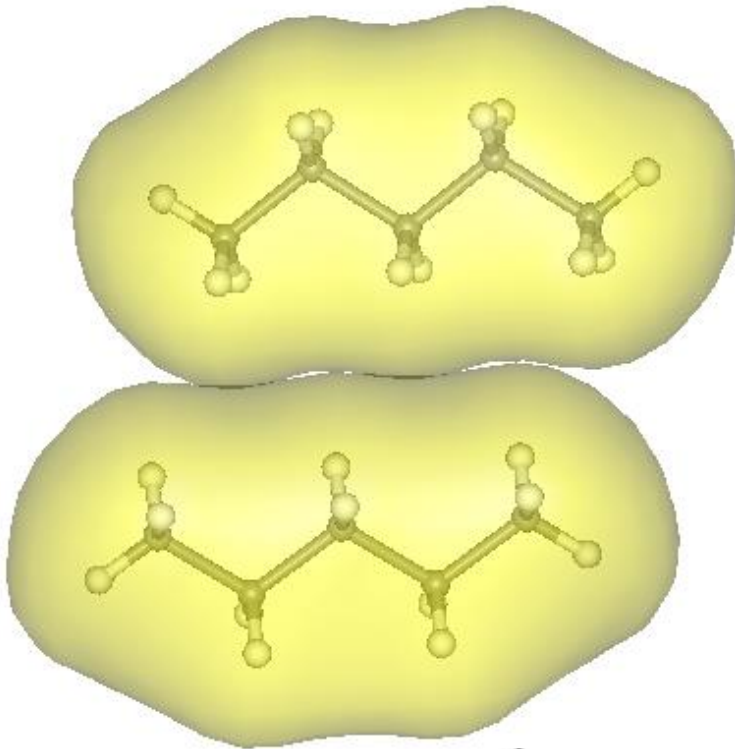
All'**aumentare del peso molecolare** aumenta la superficie di contatto intermolecolare e **quindi aumentano anche le interazioni di van der Waals**

# A parità di peso molecolare (alcani isomeri) la superficie diminuisce con l'aumentare delle ramificazioni

Nome	p.e. (°C)	p.f. (°C)	Densità (g/mL)
Esano	68.7	- 95	0.659
2-Metilpentano	60.3	- 154	0.653
3-Metilpentano	63.3	- 118	0.664
2,3-Dimetilbutano	58.0	- 129	0.661
2,2-Dimetilbutano	49.7	- 98	0.649

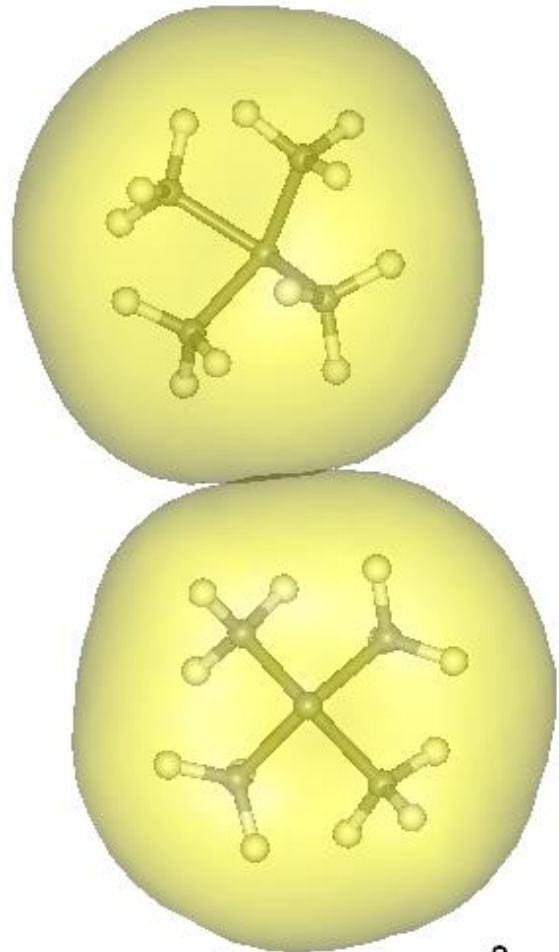


**Le ramificazioni tendono a globulizzare la molecola, rendendo meno estesi i possibili punti di contatto molecola-molecola**



area superficiale:  $132 \text{ \AA}^2$

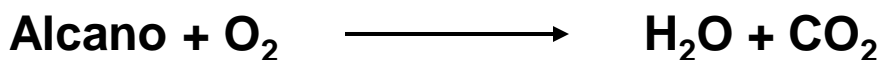
**n-pentano**  
**p.e. =  $36^\circ\text{C}$**



area superficiale:  $117 \text{ \AA}^2$

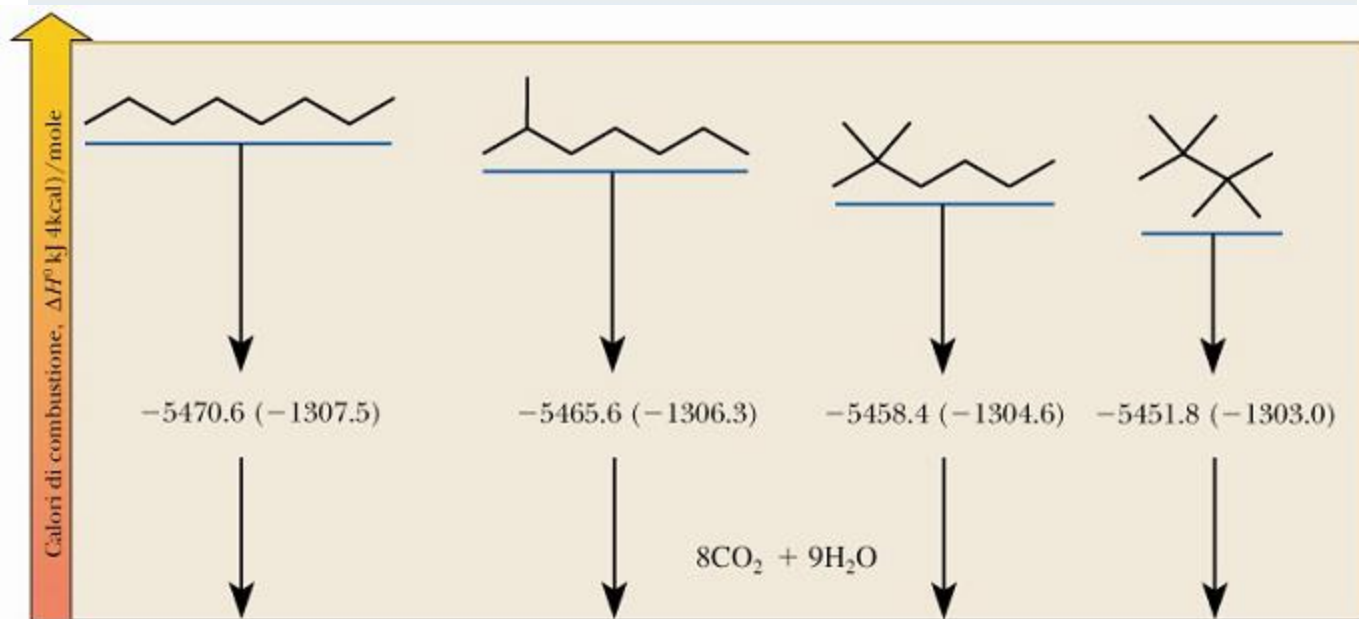
**neopentano**  
**p.e. =  $9.5^\circ\text{C}$**

**La stabilità di alcani isomeri aumenta con l'aumentare del grado di ramificazione**  
**Il calore liberato nella loro reazione di combustione ( $\Delta H^\circ$  di reazione) può essere utilizzato per fare un confronto tra stabilità relative**



Calori di combustione dei quattro isomeri strutturali del  $\text{C}_8\text{H}_{18}$

Idrocarburo	Formula di struttura	$\Delta H^\circ$ [kJ/mole (kcal/mole)]
Ottano		-5470.6 (-1307.5)
2-Metileptano		-5465.6 (-1306.3)
2,2-Dimetilesano		-5458.4 (-1304.6)
2,2,3,3-Tetrametilbutano		-5451.8 (-1303.0)



Il calore di combustione medio equivalente alla completa ossidazione di un gruppo metilenico ( $\Delta H^\circ_{\text{CH}_2}$ ) è stato calcolato da misure effettuate su alcani non ramificati (privi quindi di tensione di torsione, tensione sterica e tensione angolare)

$$\Delta H^\circ_{\text{CH}_2} = \begin{cases} -157.4 \text{ kcal mol}^{-1} \\ -658.7 \text{ kJ mol}^{-1} \end{cases}$$

Utilizzando tale valore possono essere stimati i  $\Delta H^\circ$  di combustione di cicloalcani ipoteticamente privi di tensione d'anello. La differenza tra i valori di  $\Delta H^\circ$  sperimentali e quelli calcolati fornisce così una misura quantitativa della tensione d'anello presente in ogni determinato cicloalcano

