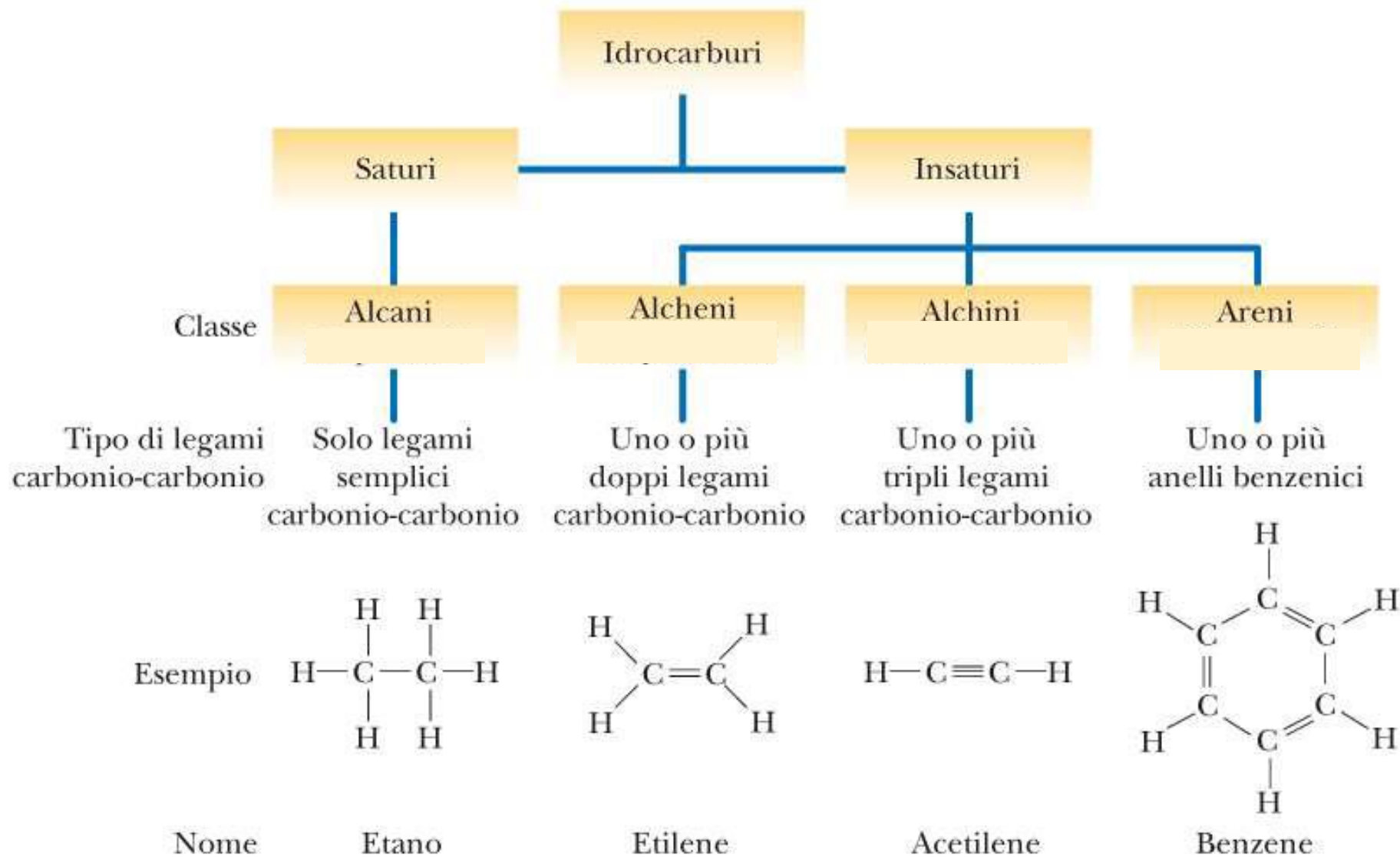


Idrocarburi

Alcani e cicloalcani



Nomenclatura degli alcani lineari

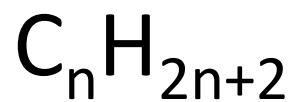



TABELLA 3.1 Nomi, formule molecolari e formule di struttura condensate dei primi 20 alcani con catene non ramificate

| Nome | Formula molecolare | Formula di struttura condensata | Nome | Formula molecolare | Formula di struttura condensata |
|---------|---------------------------------|---|-------------|---------------------------------|--|
| Metano | CH ₄ | CH ₄ | Undecano | C ₁₁ H ₂₄ | CH ₃ (CH ₂) ₉ CH ₃ |
| Etano | C ₂ H ₆ | CH ₃ CH ₃ | Dodecano | C ₁₂ H ₂₆ | CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CH ₃ |
| Propano | C ₃ H ₈ | CH ₃ CH ₂ CH ₃ | Tridecano | C ₁₃ H ₂₈ | CH ₃ (CH ₂) ₁₁ CH ₃ |
| Butano | C ₄ H ₁₀ | CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₃ | Tetradecano | C ₁₄ H ₃₀ | CH ₃ (CH ₂) ₁₂ CH ₃ |
| Pentano | C ₅ H ₁₂ | CH ₃ (CH ₂) ₃ CH ₃ | Pentadecano | C ₁₅ H ₃₂ | CH ₃ (CH ₂) ₁₃ CH ₃ |
| Esano | C ₆ H ₁₄ | CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃ | Esadecano | C ₁₆ H ₃₄ | CH ₃ (CH ₂) ₁₄ CH ₃ |
| Eptano | C ₇ H ₁₆ | CH ₃ (CH ₂) ₅ CH ₃ | Eptadecano | C ₁₇ H ₃₆ | CH ₃ (CH ₂) ₁₅ CH ₃ |
| Ottano | C ₈ H ₁₈ | CH ₃ (CH ₂) ₆ CH ₃ | Ottadecano | C ₁₈ H ₃₈ | CH ₃ (CH ₂) ₁₆ CH ₃ |
| Nonano | C ₉ H ₂₀ | CH ₃ (CH ₂) ₇ CH ₃ | Nonadecano | C ₁₉ H ₄₀ | CH ₃ (CH ₂) ₁₇ CH ₃ |
| Decano | C ₁₀ H ₂₂ | CH ₃ (CH ₂) ₈ CH ₃ | Eicosano | C ₂₀ H ₄₂ | CH ₃ (CH ₂) ₁₈ CH ₃ |

TABELLA 3.2 Prefissi usati nel sistema IUPAC per indicare la presenza di atomi di carbonio da 1 a 20 in catene non ramificate

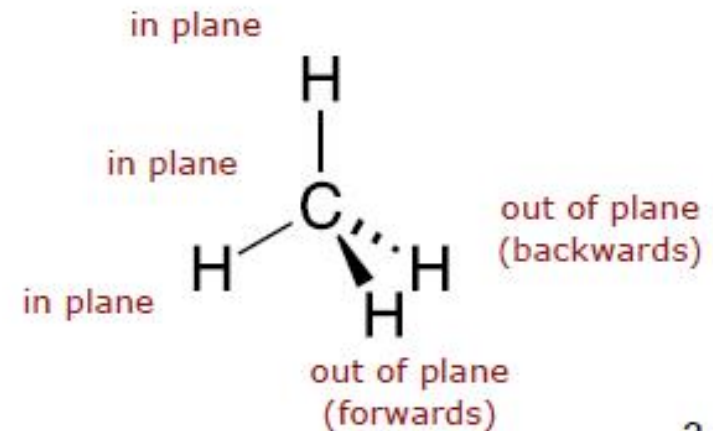
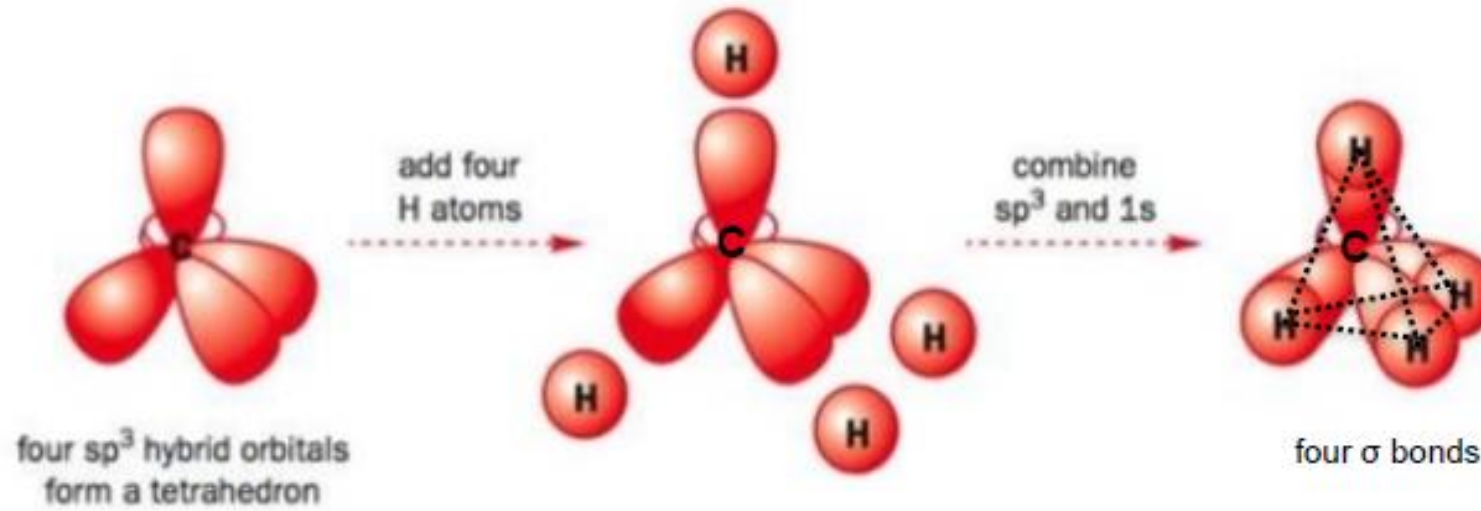
| Prefisso | Numeri di atomi di carbonio | Prefisso | Numeri di atomi di carbonio |
|-----------------|------------------------------------|-----------------|------------------------------------|
| Met- | 1 | Undec- | 11 |
| Et- | 2 | Dodec- | 12 |
| Prop- | 3 | Tridec- | 13 |
| But- | 4 | Tetradec- | 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 |

Alcani lineari

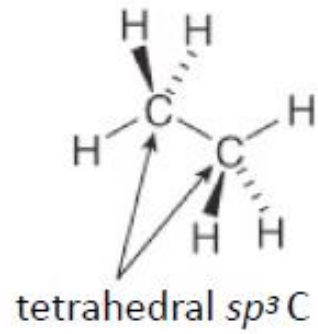
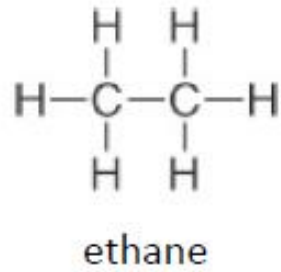
| | | |
|--|----|---------------------------------|
| | 1 | CH ₄ |
| | 2 | C ₂ H ₆ |
| | 3 | C ₃ H ₈ |
| | 4 | C ₄ H ₁₀ |
| | 5 | C ₅ H ₁₂ |
| | 6 | C ₆ H ₁₄ |
| | 7 | C ₇ H ₁₆ |
| | 8 | C ₈ H ₁₈ |
| | 9 | C ₉ H ₂₀ |
| | 10 | C ₁₀ H ₂₂ |
|  | 20 | C ₂₀ H ₄₂ |

Empirical formula: C_nH_{2n+2}

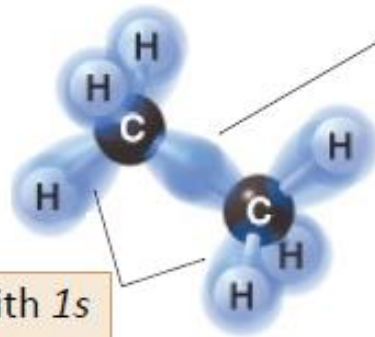
Metano



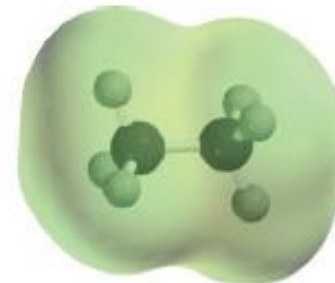
Etano



Two sp^3 hybrids overlap giving the C-C σ bond



sp^3 hybrids on C overlap with $1s$ orbitals on H giving the C-H σ bonds.



Residuo alchilico R

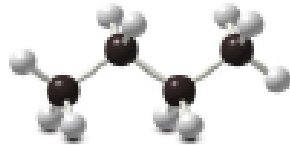
| TABELLA 3.3 Nomi dei più comuni gruppi alchilici | | | |
|--|---|---------------------|---|
| Nome | Formula di struttura condensata | Nome | Formula di struttura condensata |
| Metile | —CH_3 | Isobutile | $\text{—CH}_2\text{CHCH}_3$ CH_3 |
| Etile | $\text{—CH}_2\text{CH}_3$ | <i>sec</i> -Butile | $\text{—CHCH}_2\text{CH}_3$ CH_3 |
| Propile | $\text{—CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ | <i>terz</i> -Butile | CH_3 —CCH_3 CH_3 |
| Isopropile | —CHCH_3 CH_3 | | |
| Butile | $\text{—CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ | | |

abbreviazione di "secondario"

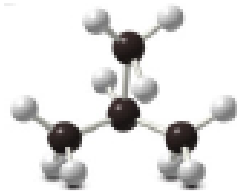
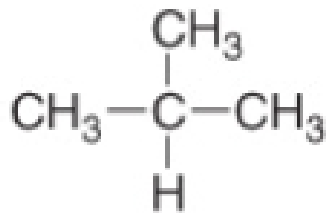
abbreviazione di "terziario"

Isomeri costituzionali

- Isomeri costituzionali: hanno la stessa formula molecolare ma differiscono nel modo in cui gli atomi sono legati tra loro
- Esistono due alcani con la stessa formula molecolare C_4H_{10} ma hanno proprietà chimico fisiche diverse



Alcano lineare
butano



Alcano ramificato
2-metilpropano (isobutano)

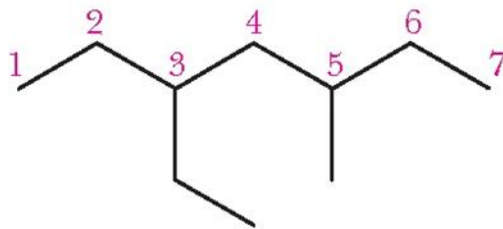
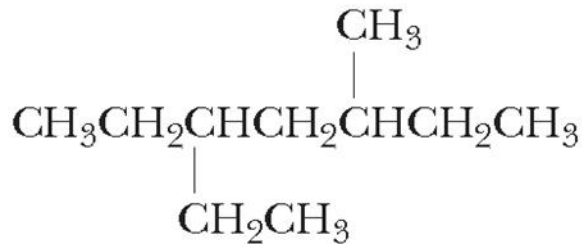
Isomeri costituzionali

Tabella 4.1 Alcani a catena lineare

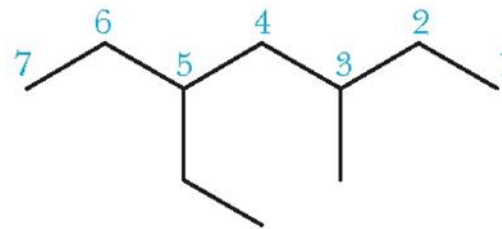
| Numero di atomi di C | Formula molecolare | Nome (<i>n</i> -alcano) | Numero di isomeri costituzionali |
|----------------------|---------------------------------|--------------------------|----------------------------------|
| 1 | CH ₄ | metano | — |
| 2 | C ₂ H ₆ | etano | — |
| 3 | C ₃ H ₈ | propano | — |
| 4 | C ₄ H ₁₀ | butano | 2 |
| 5 | C ₅ H ₁₂ | pentano | 3 |
| 6 | C ₆ H ₁₄ | esano | 5 |
| 7 | C ₇ H ₁₆ | eptano | 9 |
| 8 | C ₈ H ₁₈ | ottano | 18 |
| 9 | C ₉ H ₂₀ | nonano | 35 |
| 10 | C ₁₀ H ₂₂ | decano | 75 |
| 20 | C ₂₀ H ₄₂ | eicosano | 366.319 |

Nomenclatura degli alcani

- Individuare la catena carboniosa più lunga e assegnarle il nome
 - per gli alcani inizia e finisce con un metile
- Numerarla in modo da dare al sostituito incontrato per primo il numero più basso, se due sostituenti nella stessa posizione, si assegna il numero più basso al sostituito che viene prima nell'ordine alfabetico



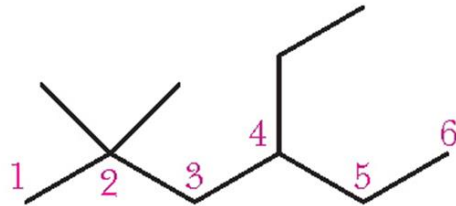
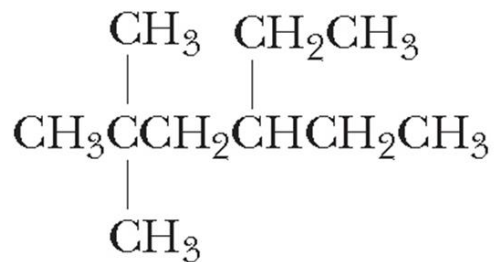
3-Etil-5-metileptano



(e non 3-metil-5-etileptano)

Nomenclatura degli alcani

- Se sono presenti più sostituenti identici, usare i prefissi di-, tri-, tetra- (che non vengono considerati nell'ordine alfabetico) con tanti numeri quanti sono i residui uguali
- Elencare i sostituenti in ordine alfabetico

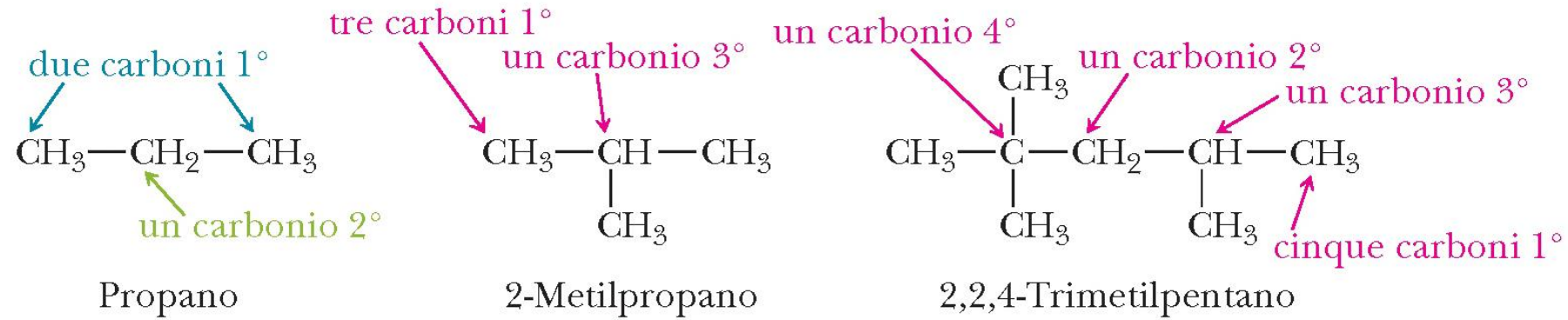


4-Etil-2,2-dimetilesano
(e non 2,2-dimetil-4-etilesano)

Esercizio

- Scrivere le formule di tutti gli isomeri costituzionali di butano, pentano ed esano e assegnarli il nome

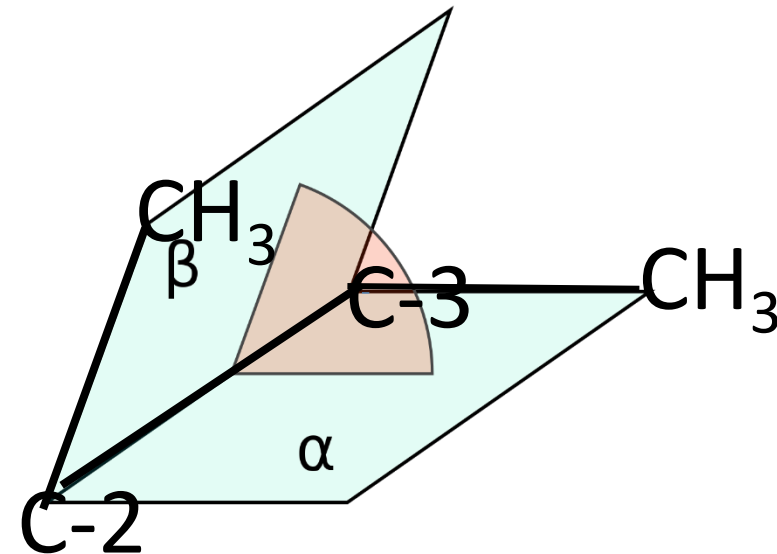
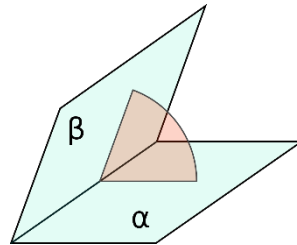
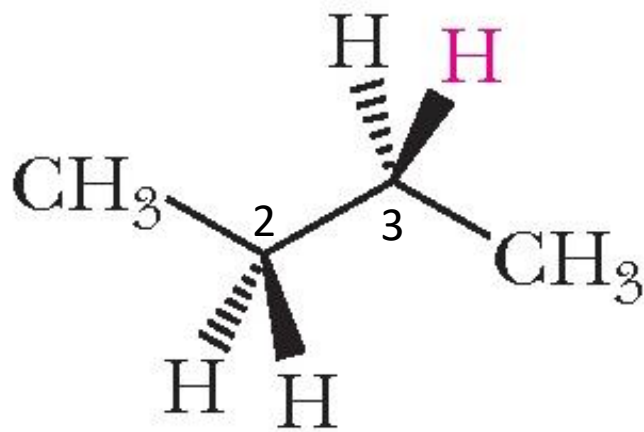
Classificazione dei carboni



CH₃- metile
-CH₂- metilene
CH metino

Conformazione degli alcani

- Conformazione: ciascuna disposizione tridimensionale degli atomi che deriva dalla rotazione intorno ad un legame semplice, varia l'angolo diedro tra due atomi di carbonio

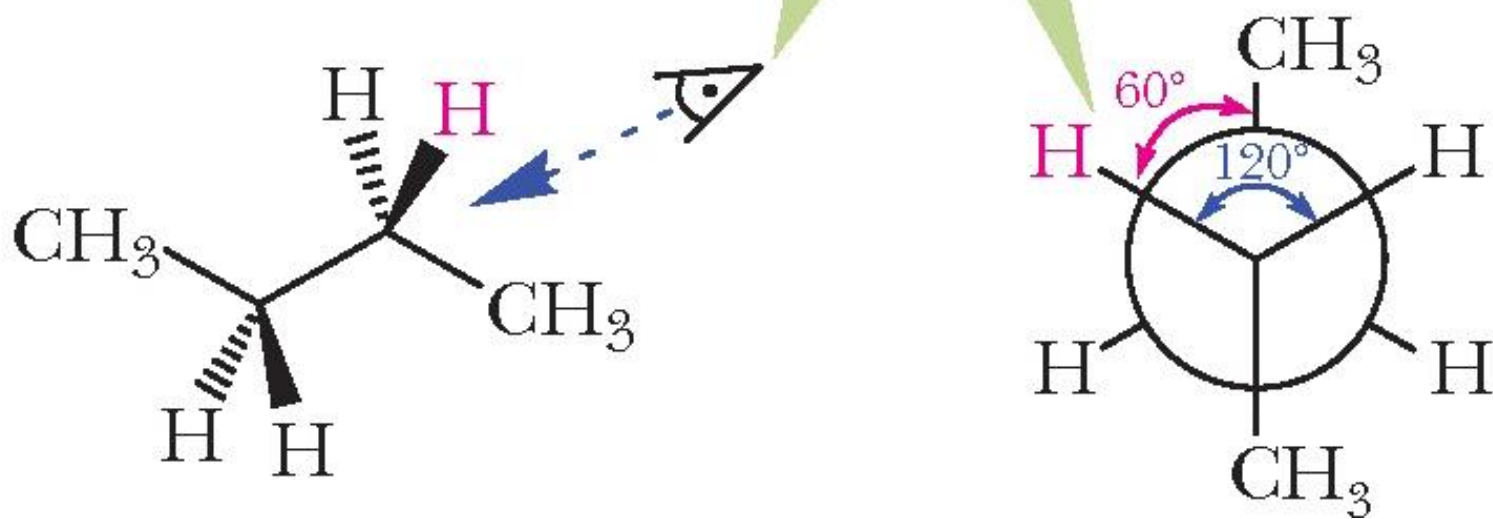


Angolo diedro: angolo tra due semipiani aventi per origine la stessa retta

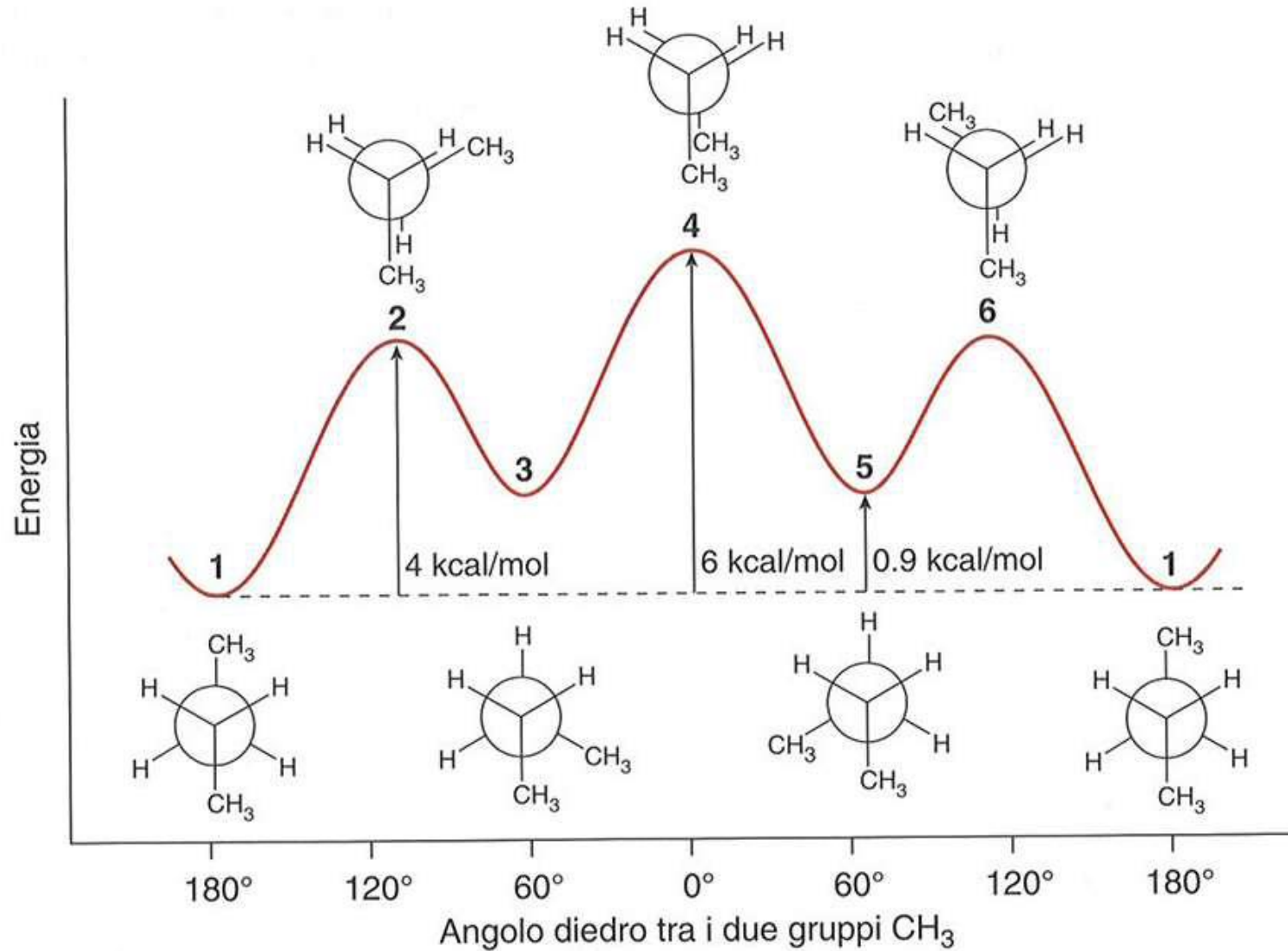
Conformazione degli alcani

- Proiezioni di Newman

è spesso utile disegnare un occhio nel piano della pagina per visualizzare la proiezione Newman



Conformazioni del butano



Conformazioni eclissate

2, 4 e 6

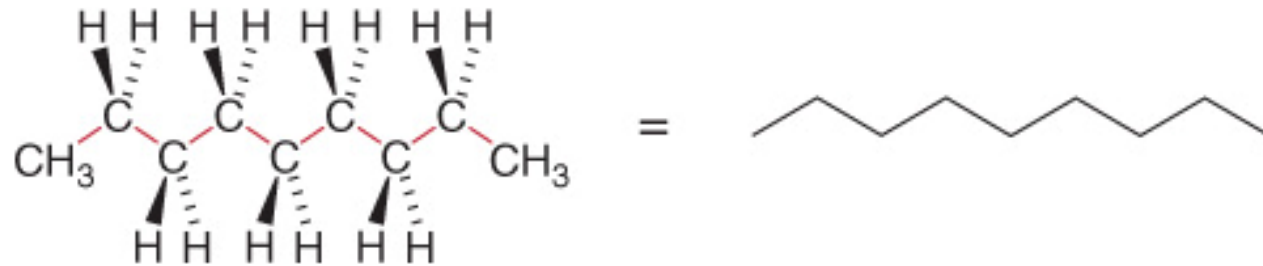
4 conformazione meno stabile

Conformazioni sfalsate

1 (anti); **3,5** (gauche)

1 conformazione più stabile

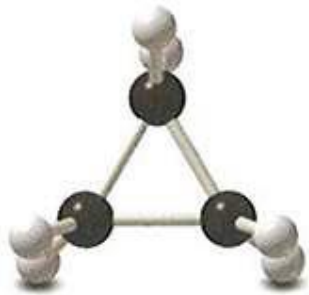
Formule di struttura a linee e angoli (a zigzag)



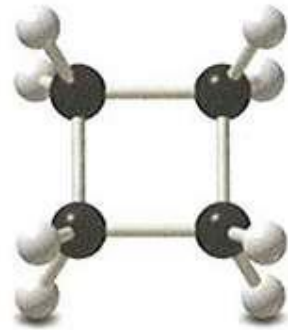
Cicloalcani

formula C_nH_{2n}

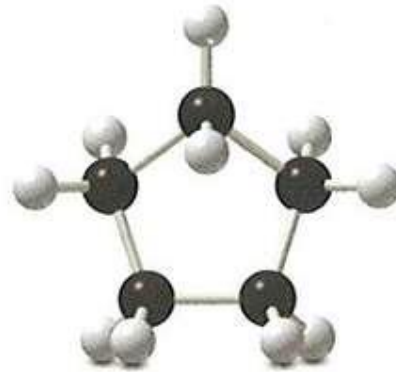
Cicloalcani semplici



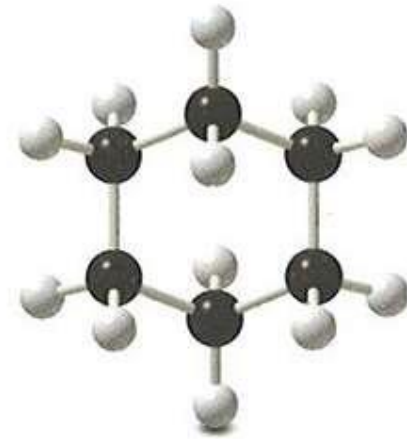
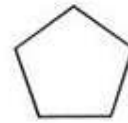
ciclopropano
 C_3H_6



ciclobutano
 C_4H_8



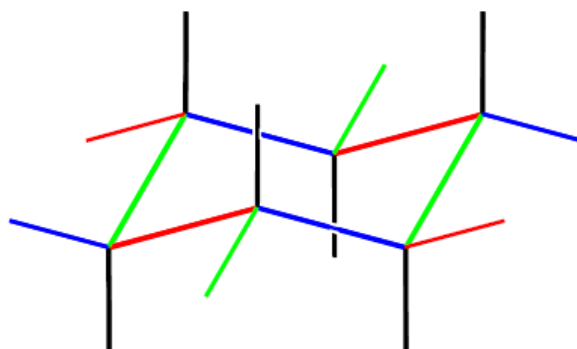
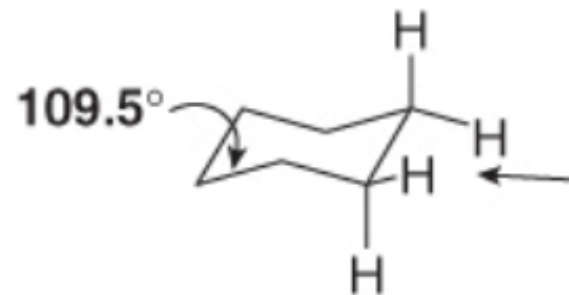
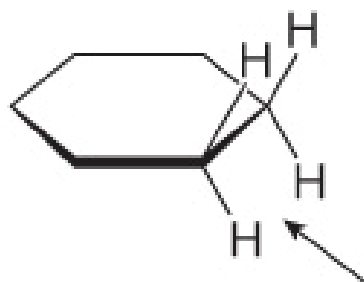
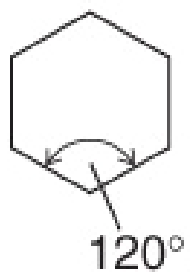
ciclopentano
 C_5H_{10}



cicloesano
 C_6H_{12}



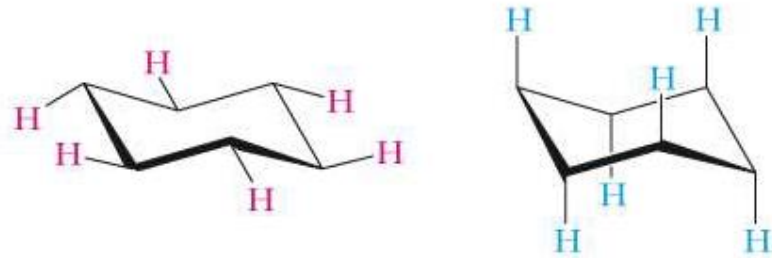
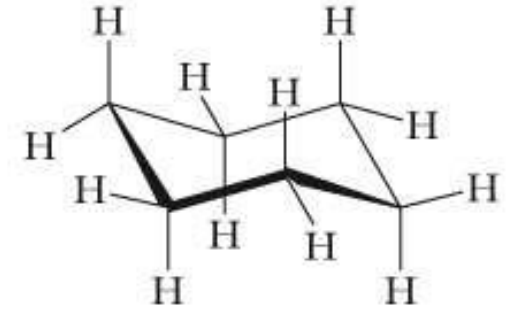
Cicloesano C_6H_{12}



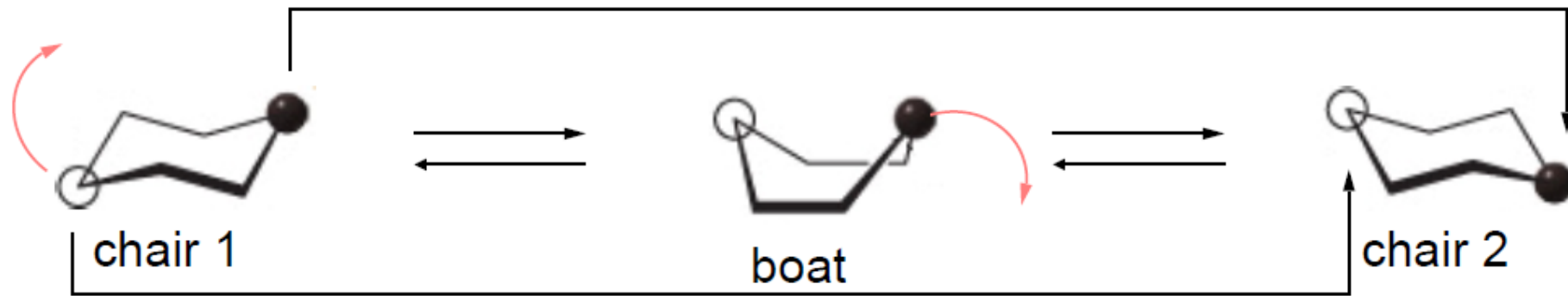
Conformazione a sedia

Conformazione a sedia del cicloesano

- 6 idrogeni assiali
 - 3 rivolti verso l'alto e 3 rivolti verso il basso
- 6 idrogeni equatoriali
 - 3 rivolti verso l'alto e 3 rivolti verso il basso



Interconversione tra le due conformazioni a sedia attraverso la conformazione a barca



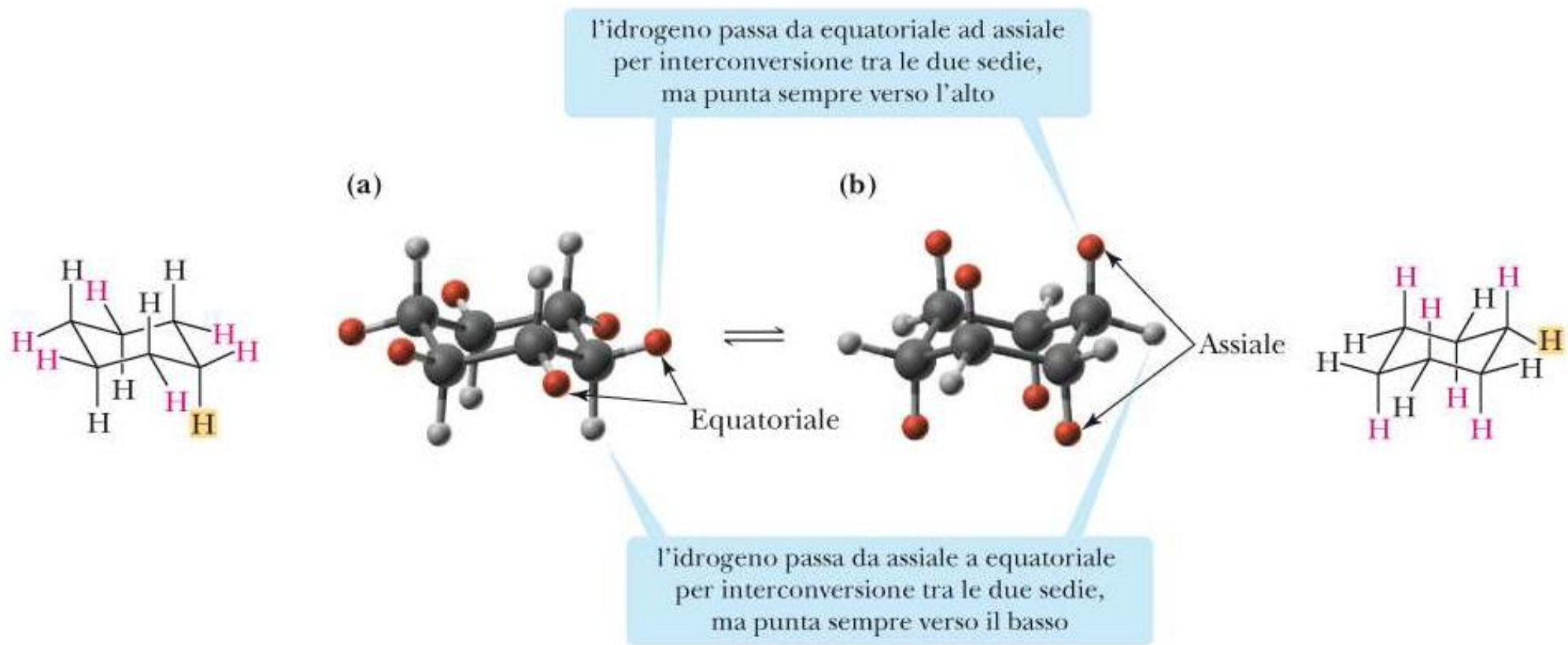
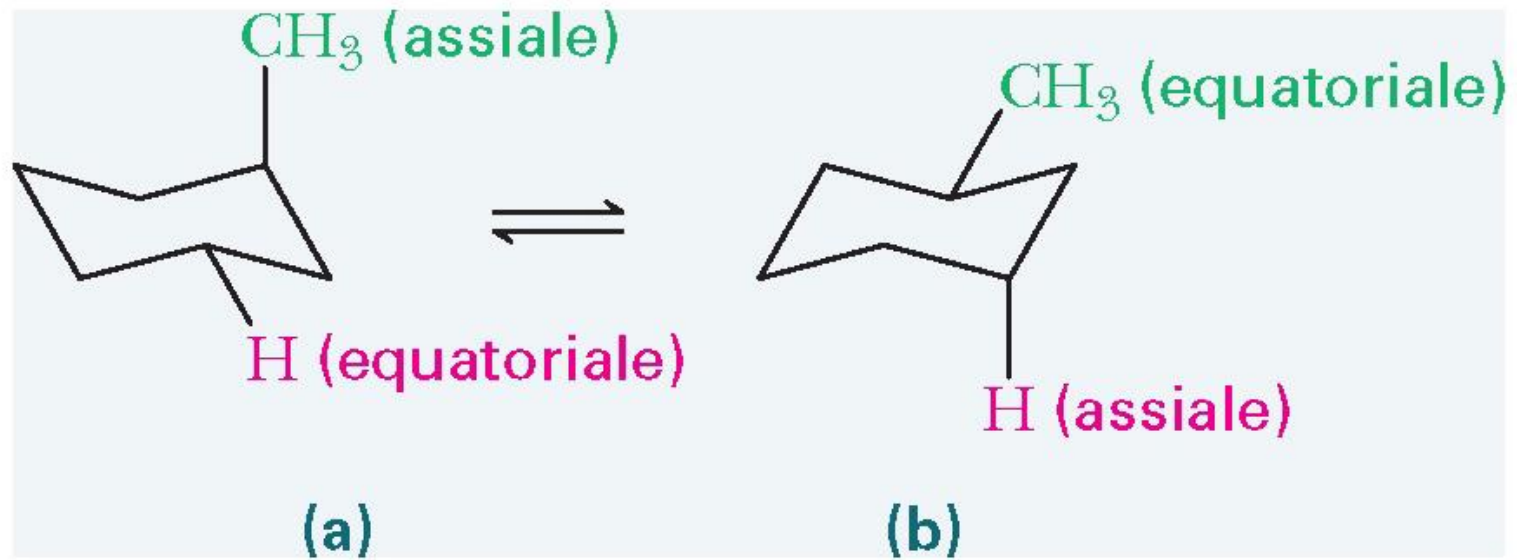


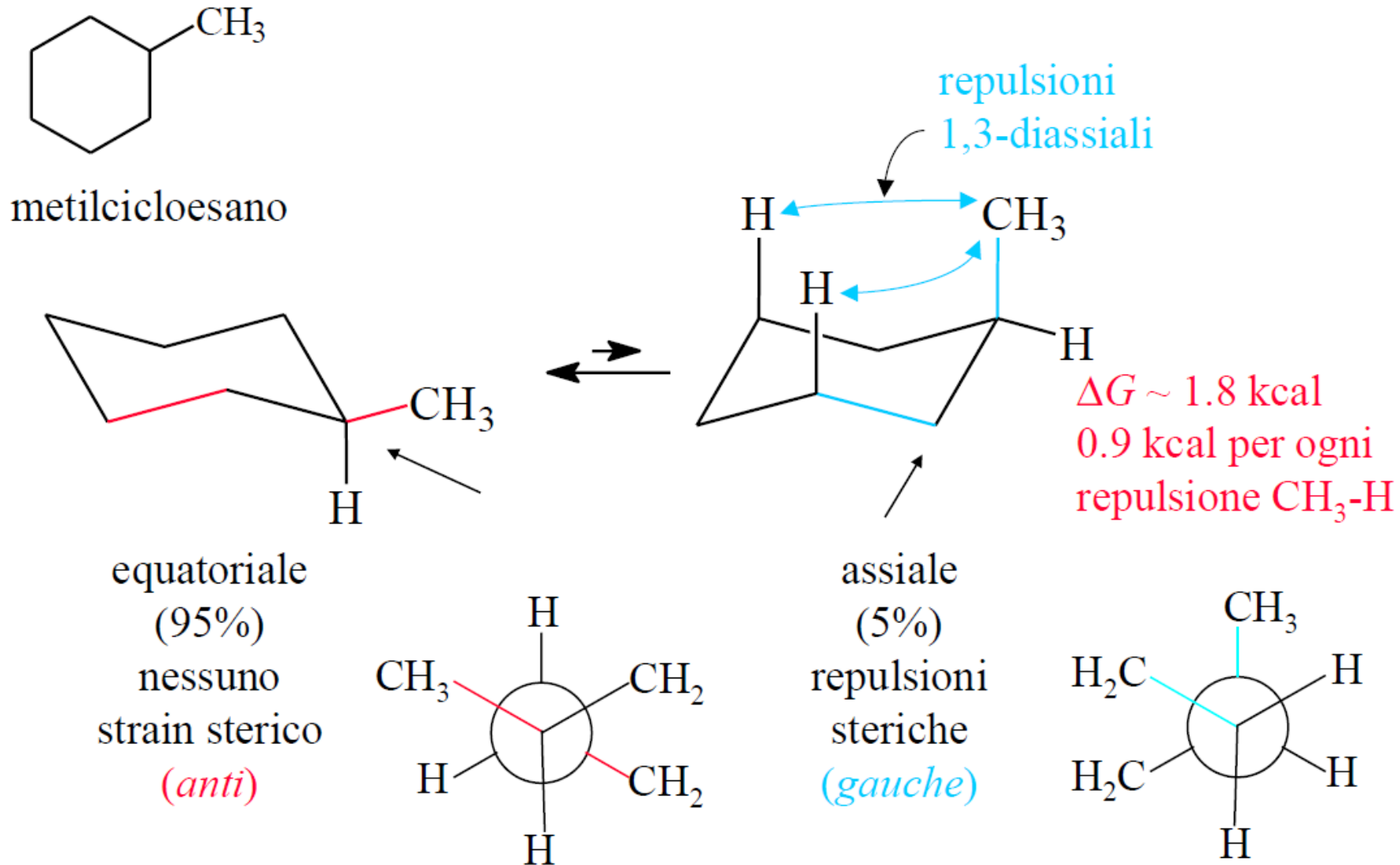
FIGURA 3.10

Interconversione tra le due conformazioni a sedia del cicloesano. Tutti i legami C—H che sono equatoriali in una sedia sono assiali nell'altra e viceversa.

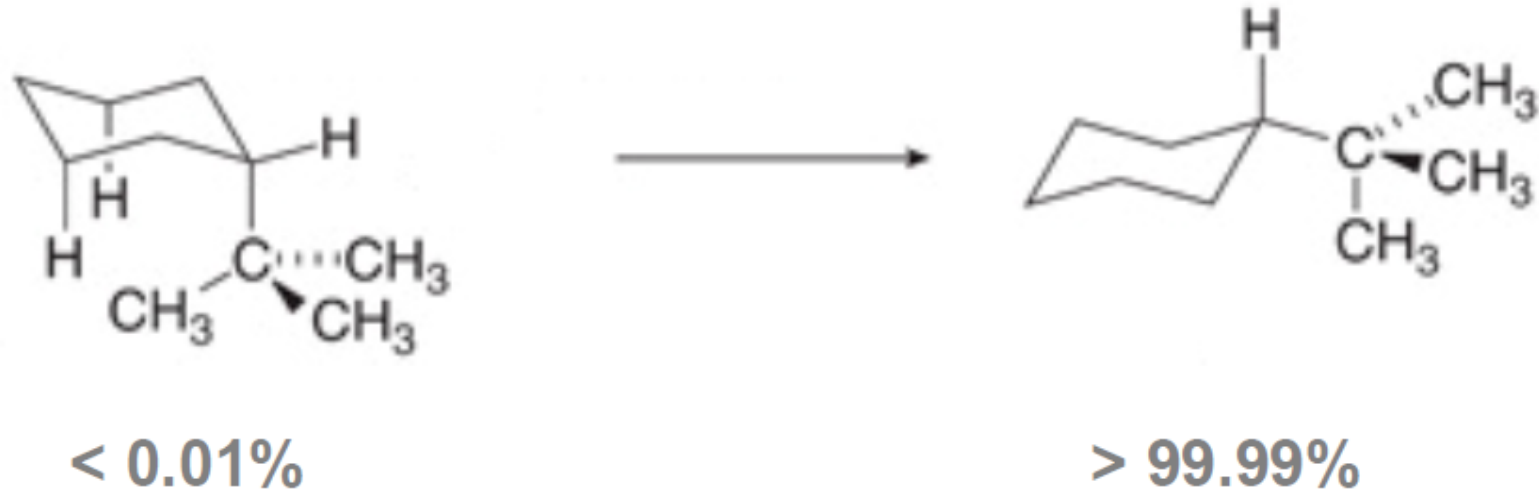
Metil cicloesano



Interazioni 1,3-diassiali



tert-Butilcicloesano



Il gruppo tert-butilico congela l'equilibrio conformazionale

Cicloalcani disostituiti

Stereoisomeri: isomeri che hanno la medesima connettività tra gli atomi ma differente orientazione 3D degli atomi nello spazio.

Stereoisomeri

configurazionali

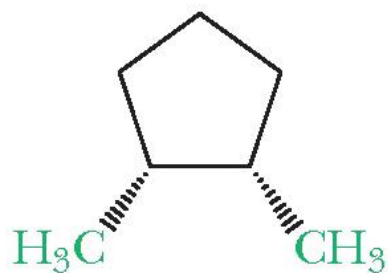
non si possono
interconvertire se
non rompendo un
legame

isomeri geometrici

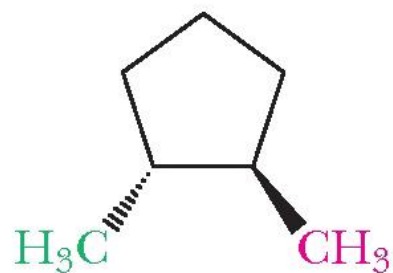
conformazionali

si possono
interconvertire per
rotazione attorno a
un legame

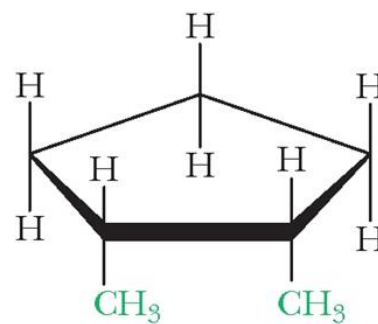
Cicloalcani disostituiti isomeri geometrici



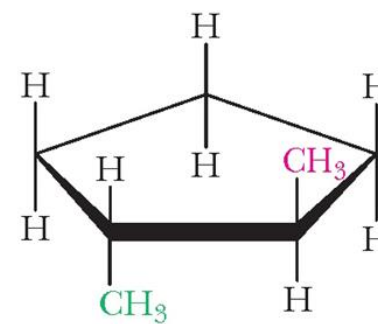
cis-1,2-Dimetil-
ciclopentano



trans-1,2-Dimetil-
ciclopentano



cis-1,2-Dimetil-
ciclopentano



trans-1,2-Dimetil-
ciclopentano

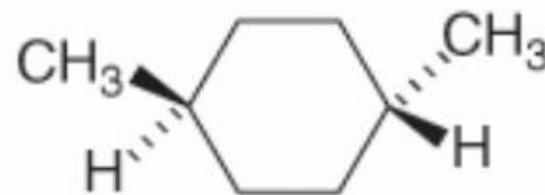
Cicloesani disostituiti

- 1,2-dimetilcicloesano
- 1,3-dimetilcicloesano
- 1,4-dimetilcicloesano

1,4-dimetilcicloesano



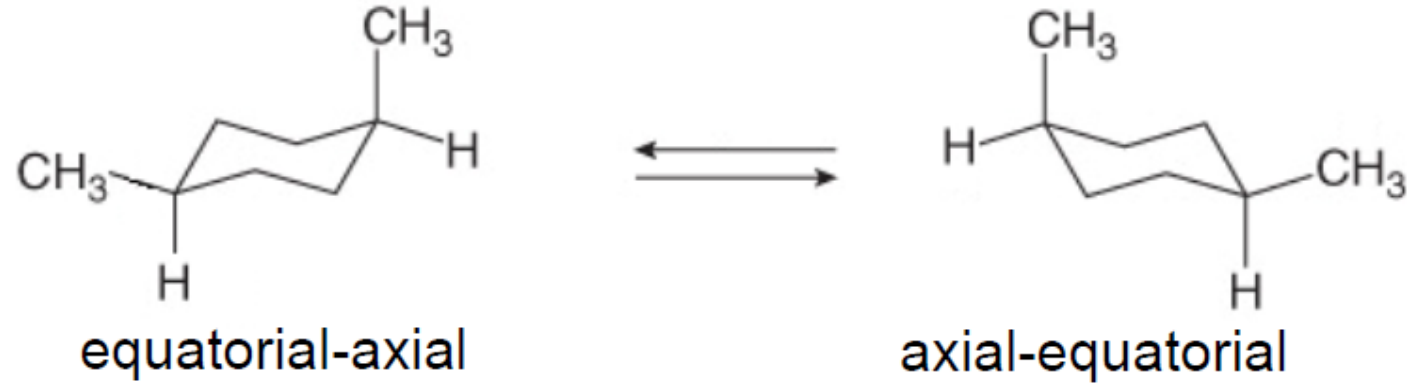
cis



trans

1,4-dimetilcicloesano

cis



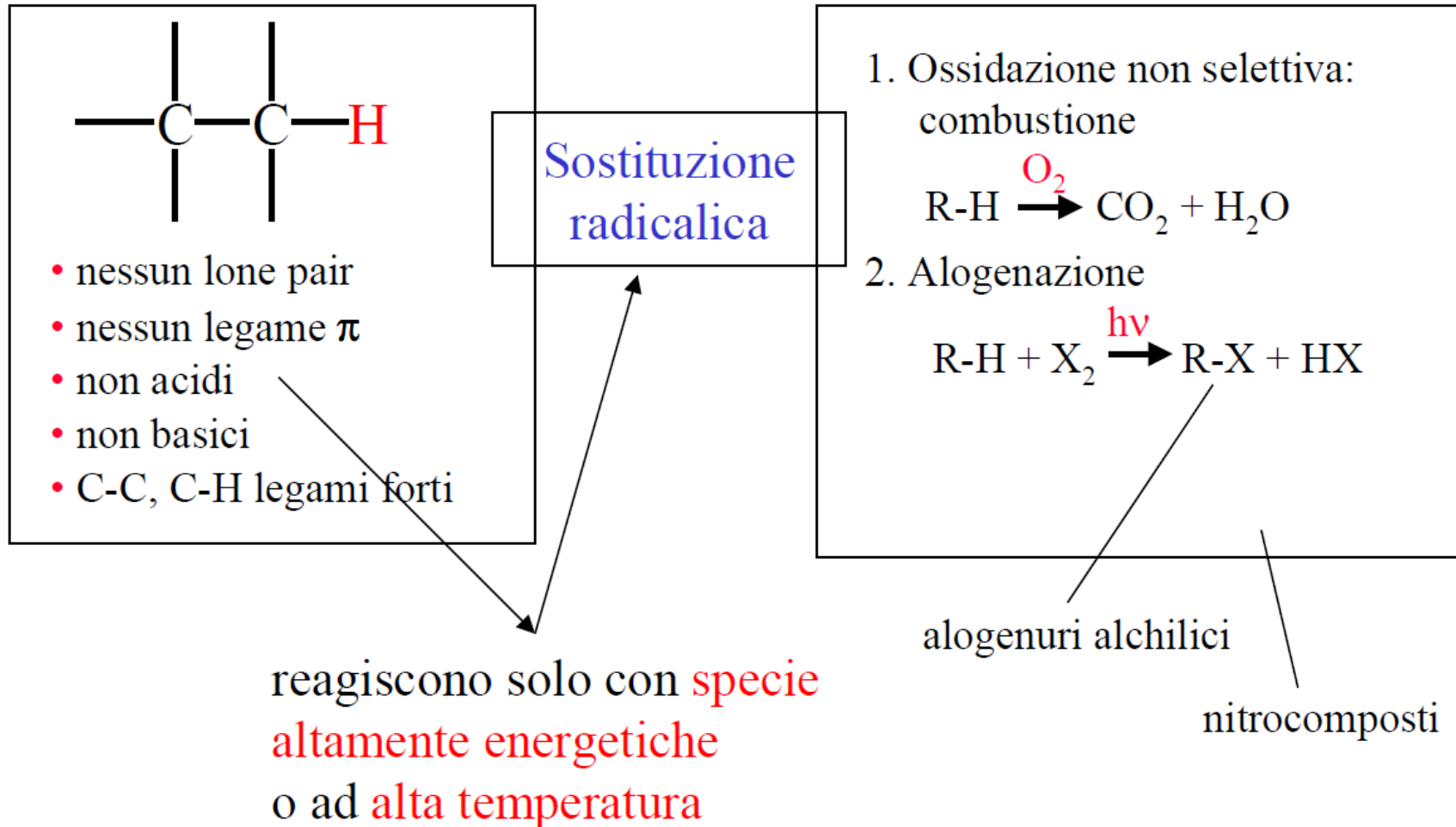
trans



Reattività degli alcani

- Gli alcani sono l'unica famiglia di molecole organiche che non ha gruppi funzionali pertanto gli alcani danno luogo a poche reazioni (sono detti inerti)

Reazioni degli idrocarburi

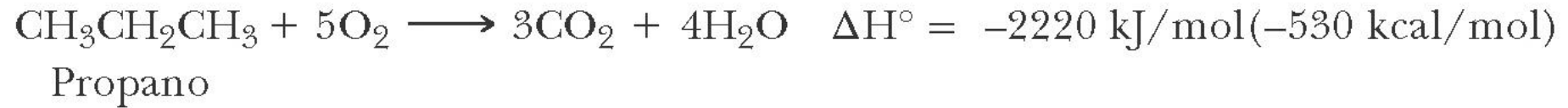


Reattività degli alcani

- Reazione di combustione:
 - La combustione è una reazione di ossido-riduzione in cui un componente si ossida e un componente si riduce. Gli alcani bruciano in presenza di ossigeno per formare anidride carbonica, acqua e calore
 - I legami C–C e C–H sono convertiti in legami C-O e H-O
 - Ogni atomo di carbonio è convertito in CO₂

Reazione di combustione

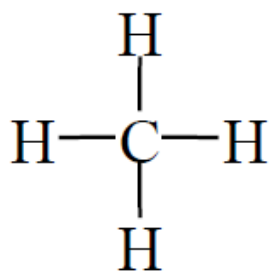
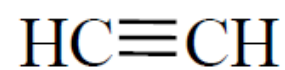
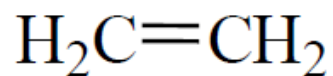
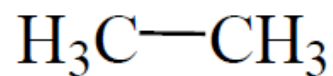
quando si bilanciano le equazioni per le reazioni di combustione degli idrocarburi, per prima cosa si bilancia il numero di atomi di carbonio, poi il numero di atomi di idrogeno, quindi si bilanciano gli atomi di ossigeno. Se l'equazione è ancora non bilanciata, valutare il raddoppio di tutti i coefficienti su ciascun lato dell'equazione



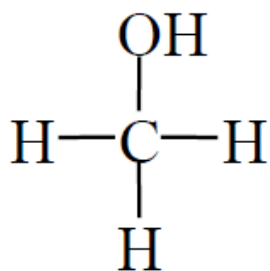
Stati di ossidazione del carbonio

- Per determinare se, in una reazione chimica, un composto organico si ossida o si riduce bisogna confrontare il numero relativo di legami C-H e C-Z (Z è un atomo più elettronegativo del C):
 - L'ossidazione ha come risultato un aumento del numero di legami C-Z o diminuzione del numero di legami C-H;
 - La riduzione ha come risultato una diminuzione del numero di legami C-Z o un aumento del numero di legami C-H.

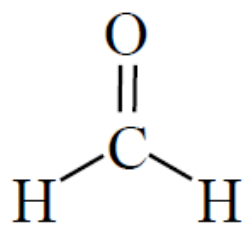
Ossidazione e riduzione



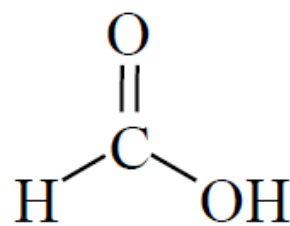
metano



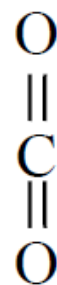
metanolo



formaldeide



acido formico



anidride
carbonica

ossidazione

—————>

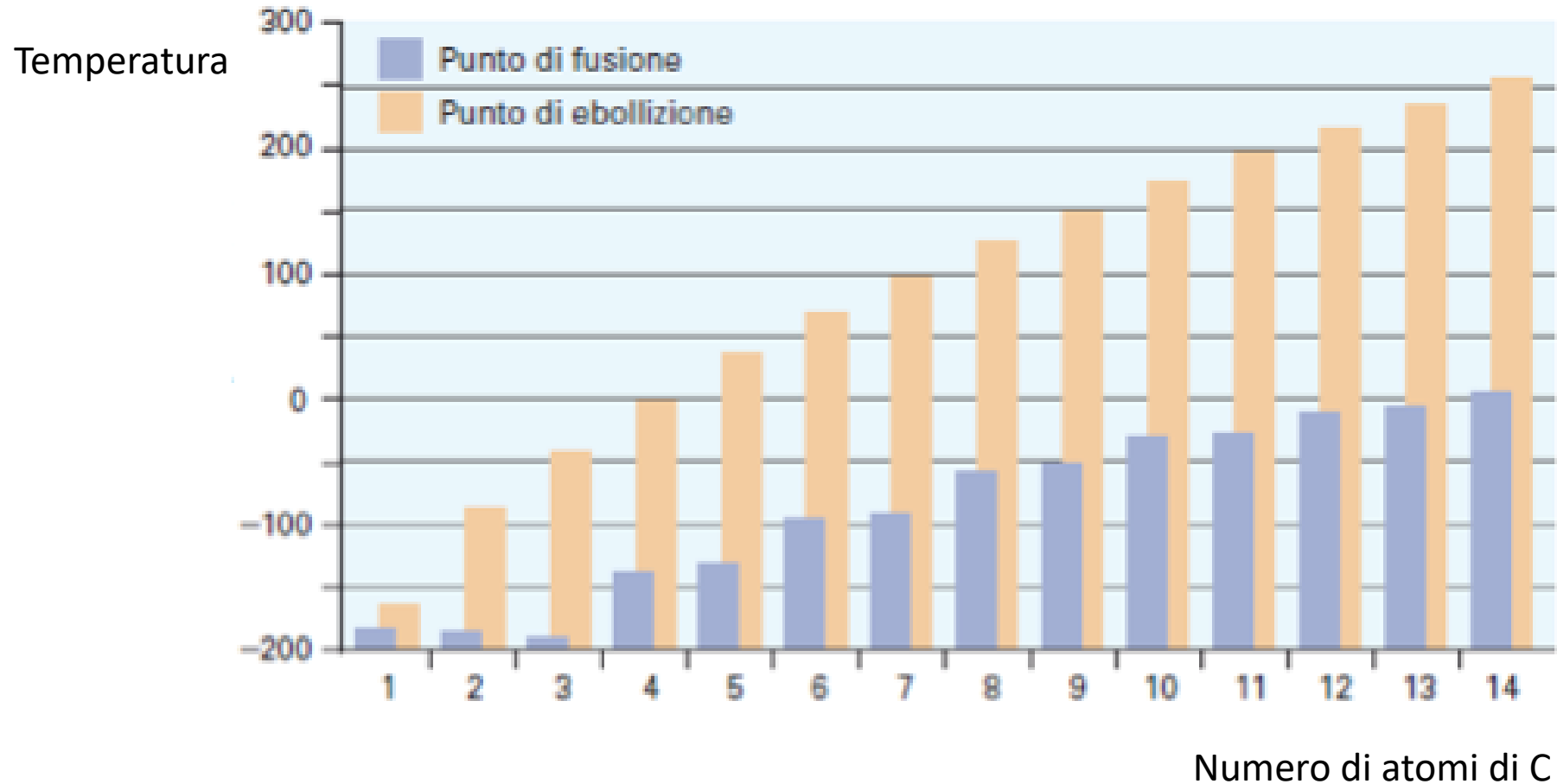
più legami C-O, meno legami C-H

riduzione

<—————

meno legami C-O, più legami C-H

Proprietà fisiche degli alcani



Solo forze di van der Waals tra le molecole

Proprietà fisiche degli alcani



Butano
(p.e. -0.5°C)



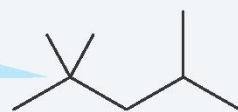
Esano
(p.e. 69°C)



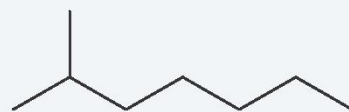
Decano
(p.e. 174°C)

negli idrocarburi non ramificati,
più lunga è la lunghezza della catena,
più grande è l'area superficiale.
Questo comporta un aumento delle
forze di dispersione e un aumento
del punto di ebollizione

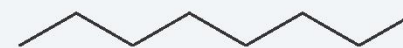
maggiore è la ramificazione, minore
è l'area superficiale, il che causa una
diminuzione delle forze di dispersione
e del punto di ebollizione



2,2,4-Trimetilpentano
(p.e. 99°C)



2-Metileptano
(p.e. 118°C)



Ottano
(p.e. 125°C)

Proprietà fisiche degli alcani

- C1-C4 gas
- C5-C17 liquidi
- >C17 solidi
- Sono meno densi dell'acqua (0.7-0.8 g/mL)
- Sono insolubili in acqua e solubili nei solventi organici apolari

Fonti degli alcani

- Gas naturale (90-95% metano, 5-10% etano, propano, butano)
- Petrolio è una complessa miscela formata in prevalenza di idrocarburi C1-C40
 - Dalla distillazione del petrolio si ottengono diverse frazioni con diversi punti di ebollizione
- Carbone

Combustibili fossili

- Sono il risultato della lenta decomposizione, in migliaia di anni, sotto alte pressioni e temperatura, di materiale organico, principalmente plankton e alghe da cui il nome di combustibile fossile
- Petrolio
 - Il petrolio è una miscela di *migliaia* di composti chimici che si estrae dal sottosuolo.
 - Il petrolio greggio si trova in tutto il mondo e varia moltissimo da zona in zona in densità, contenuto di aromatici, zolfo e metalli.

Petrolio

- La maggioranza dei suoi componenti sono:
 - **Idrocarburi**, quali alcani (chiamati paraffine), cicloalcani (chiamati nafteni), alcheni, aromatici (~10%), poliaromatici (PAH).
 - **Composti contenenti eteroatomi** come zolfo (tiofene e derivati), ossigeno (acidi e fenoli), azoto (carbazolo, chinolina).
 - **Composti metallici**, presenti in tracce – V, Ni, Fe, Al, Na, Ca, Cu, e U.

C 84-87%

H 11-14

S 0-6

N 0-1

O 0-2

Lavorazione del petrolio

- Comporta tre aspetti:
 - Approvvigionamento di greggio.
 - Conversioni: processi che convertono il greggio in prodotti desiderati (separazione, conversione, rifinitura, etc.) in modo economico e ambientalmente accettabile.
 - Prodotti: sono benzina, diesel, solventi, oli da riscaldamento e oli combustibili, lubrificanti, asfalti, oli combustibili pesanti e coke.

Raffineria

- Nella raffineria il greggio viene separato in gruppi di idrocarburi mediante la distillazione frazionata
- Ogni prodotto (miscela di composti) distilla in un range di p.eb. e viene chiamato “frazione” o “taglio”.
- I vapori distillati si raccolgono in torri di condensazione.



Raffinerie

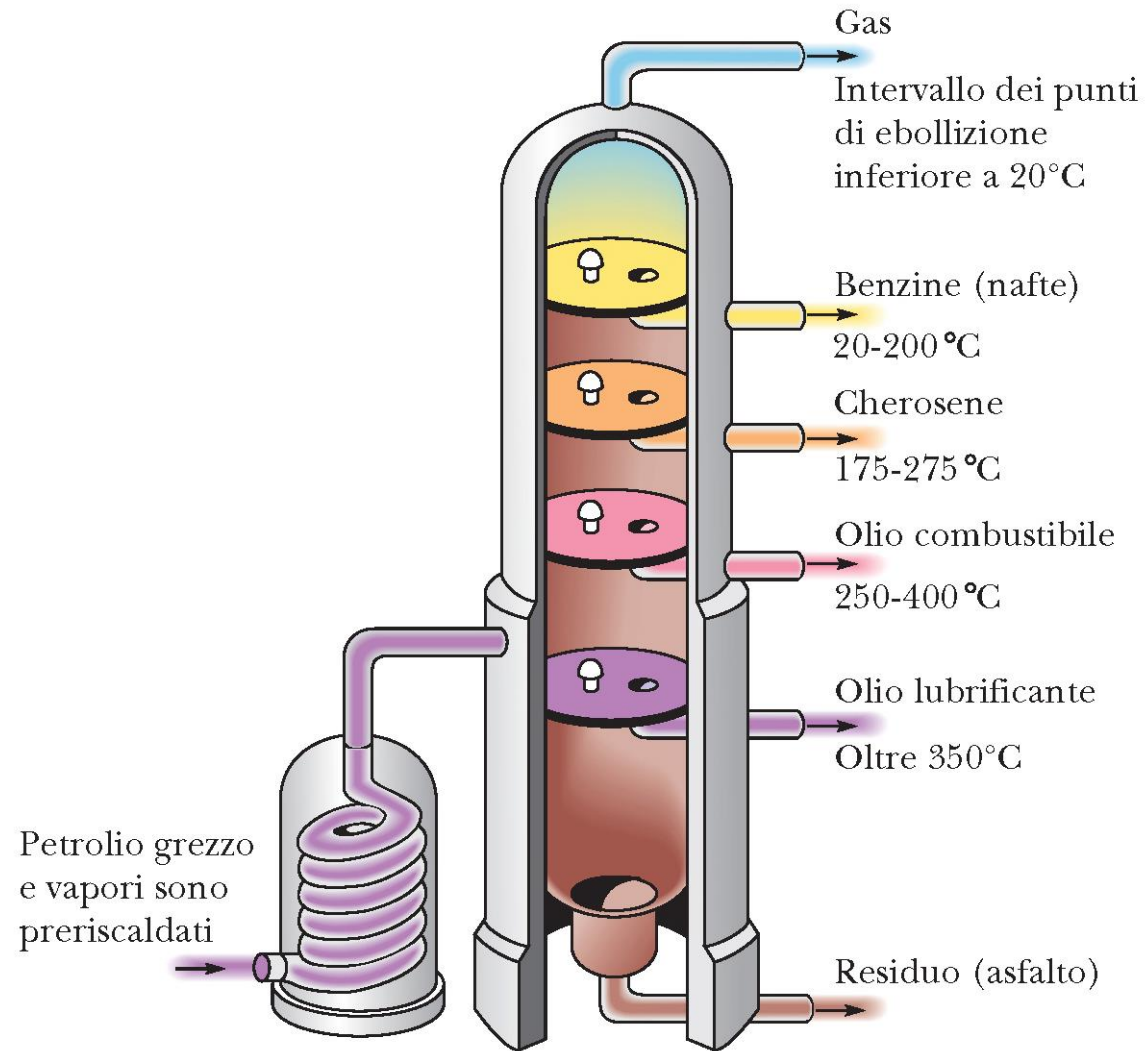
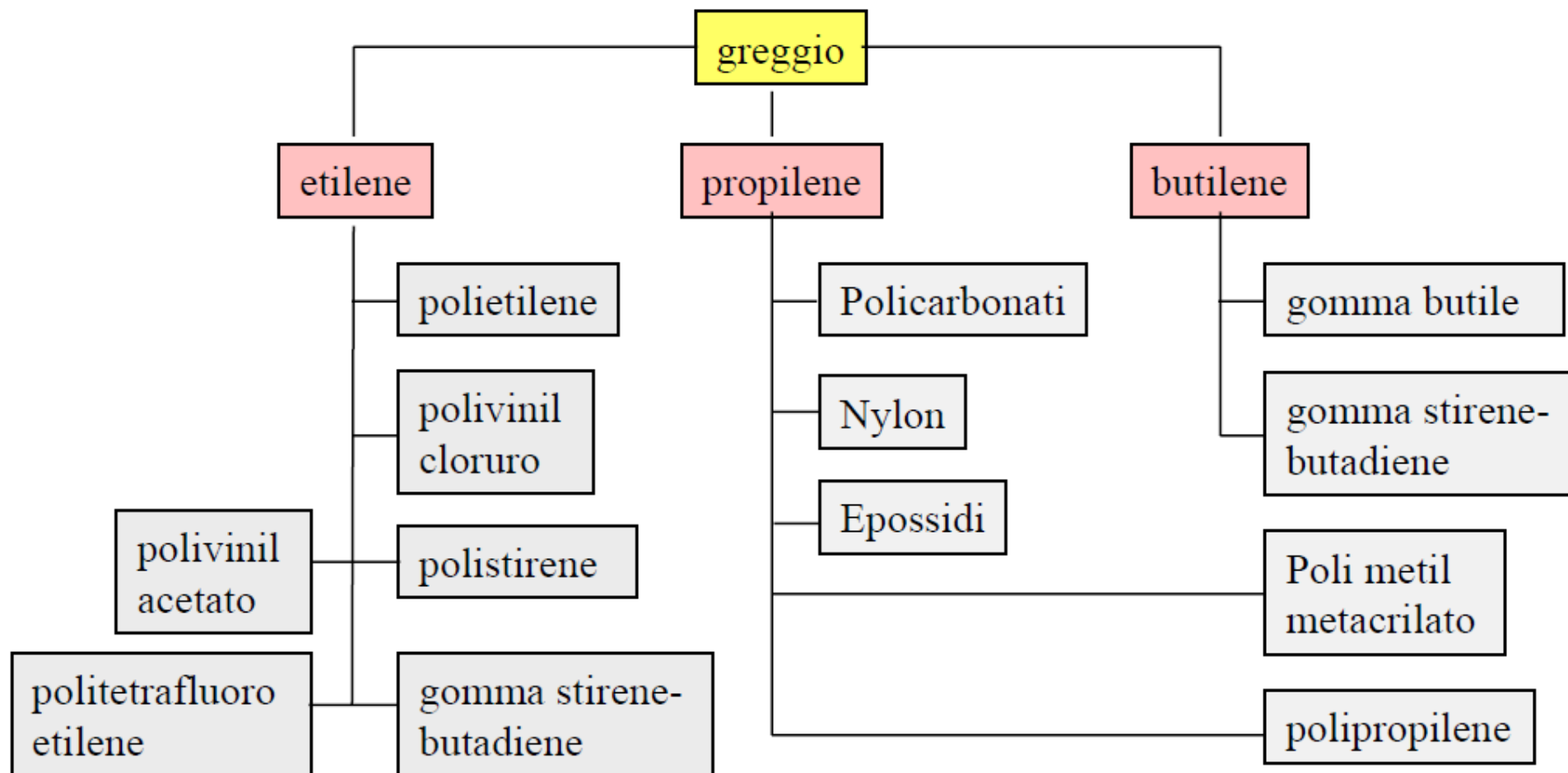


FIGURA 3.13

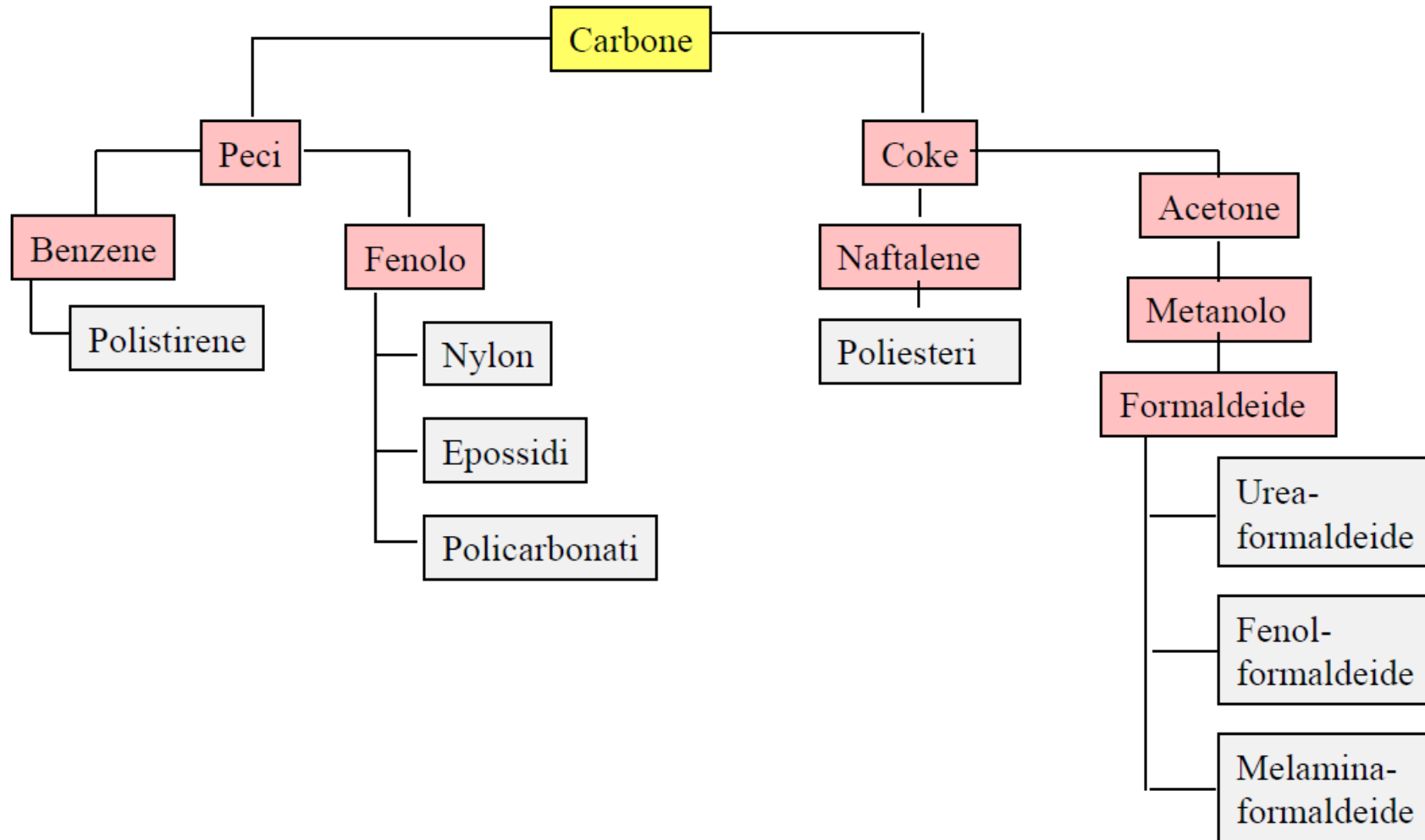
Distillazione frazionata del petrolio. Le frazioni più leggere, più volatili, sono estratte dalla parte superiore della colonna, mentre le frazioni più pesanti, meno volatili, dalla parte inferiore.

| Prodotto | Uso | Composizione (n. Carboni) | Range di p.eb. (°C) |
|---|---|--------------------------------------|----------------------------|
| Gas (metano, etano, propano, butano) | riscaldamento, cucina | 1 – 4 | < 20 |
| Nafta (leggera e pesante) | intermedio che sarà ulteriormente lavorato per fare benzina | 5 – 9 | 60 – 100 |
| Benzina | carburante per motori | 5 – 12 | 40 – 205 |
| Kerosene | carburante per aerei | 10 – 18 | 175 – 325 |
| Gasolio | combustibile per diesel e olio riscaldante | 12 – 20 | 250 – 350 |
| Olio Lubrificante | lubrificanti, grassi | 20 – 50 | 300 – 370 |
| Olio pesante | combustibile industriale | 20 – 70 | 370 – 600 |
| Residui | coke, asfalto, peci, bitumi, cere | 70 o più | sopra 600 |

Petrolio e carbone fonti di materiali per polimeri sintetici



Dal carbone



Energia vs Chemicals

