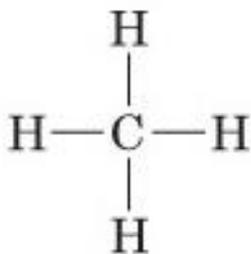
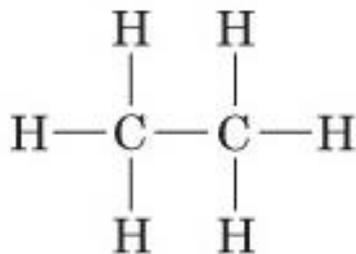


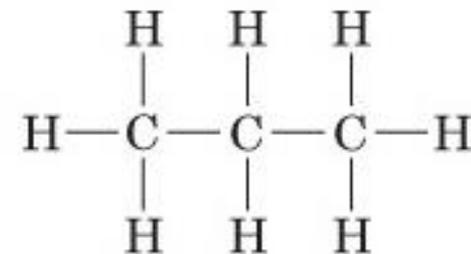
**GLI ALCANI: composti organici che hanno nella loro struttura solo atomi di C o H legati tra di loro attraverso legami «sigma»**



**Metano, CH<sub>4</sub>**



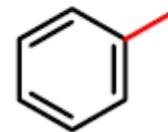
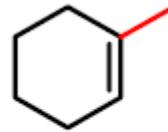
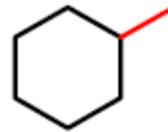
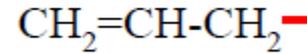
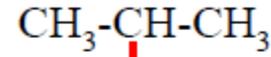
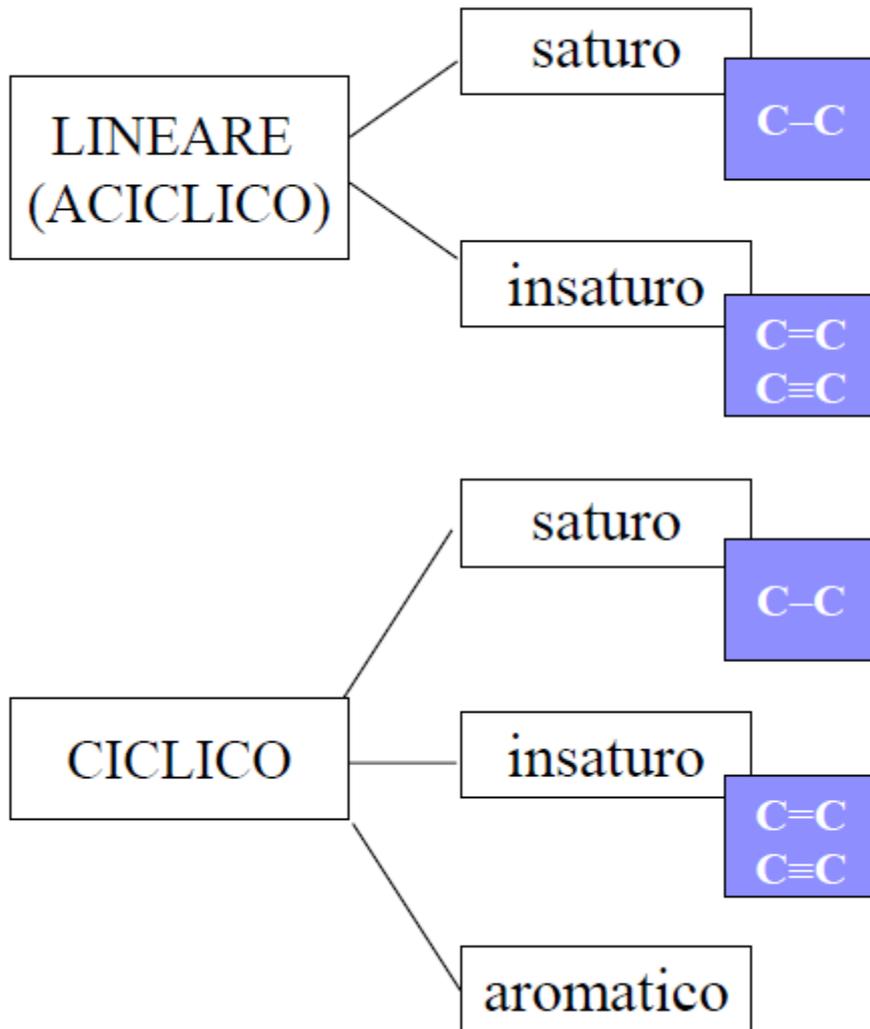
**Etano, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>**



**Propano, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>**

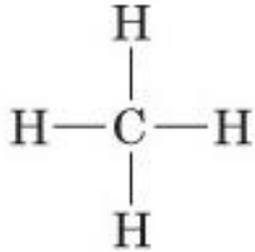
# Idrocarburi: composti organici che hanno nella loro struttura solo atomo di C o H

Alifatici: deriva dal greco *aleifar* cioè unguento; questo perché molti grassi contengono lunghe catene carboniose.



A  
L  
I  
F  
A  
T  
I  
C  
I

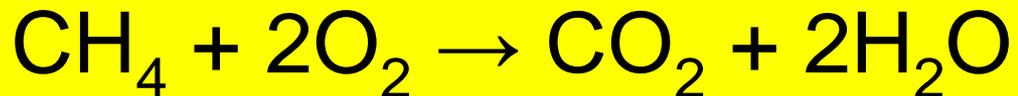
AROMATICI

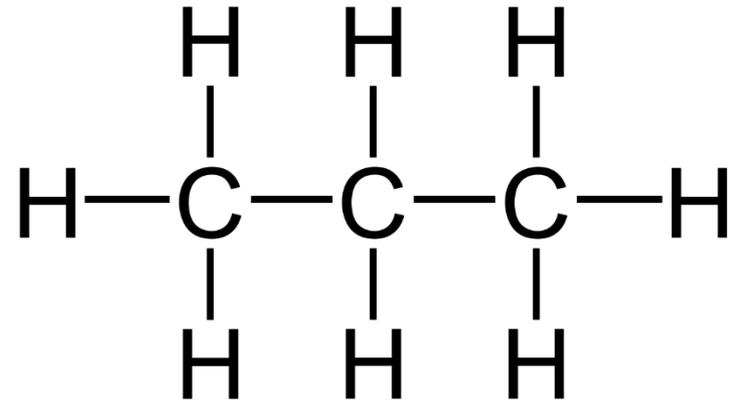


**Metano, CH<sub>4</sub>**

**Carburante per autotrazione.** Il gas naturale è utilizzato come combustibile nel settore dei trasporti e dell'autotrazione. Ad esempio le auto a metano e i veicoli con alimentazione a gas naturale. I veicoli a gas sono muniti di bombole in cui immagazzinare ad alta pressione il gas metano allo stato gassoso compresso.

- Si trova in natura sotto forma di gas
- Viene prodotto per fermentazione anaerobica di scarti e rifiuti (biogas)



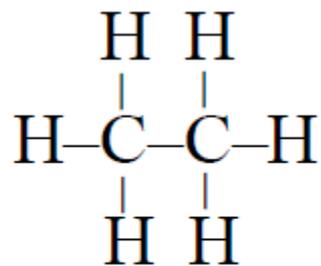


Propano



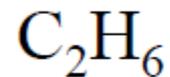
# Rappresentazione e scrittura degli alcani

## Formula strutturale



Etano

## Formula molecolare

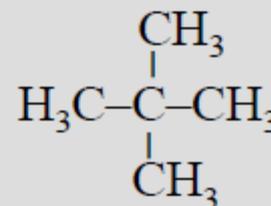
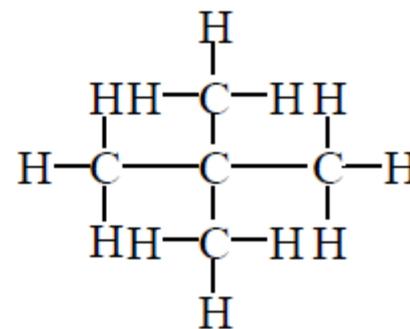
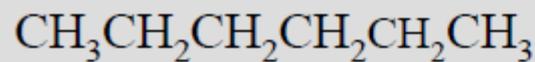
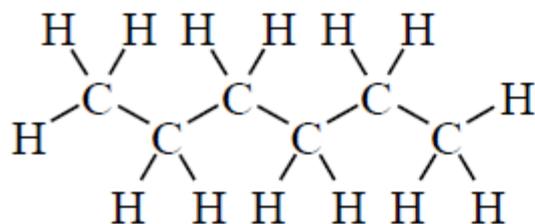


# Tipi di scrittura

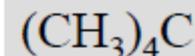
- Scrivere tutte le molecole secondo Lewis è spesso lungo e noioso.
- I chimici hanno sviluppato alcuni tipi di scritture rapide:
  - Condensata
  - Lineare
  - Poligonale

# Scrittura condensata

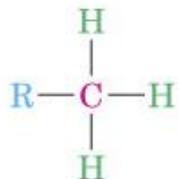
- Sono possibili vari gradi di condensazione
  - Esempi: Alcani lineari e alcani ramificati



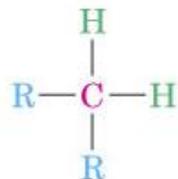
Alcuni legami vengono mantenuti



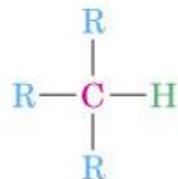
# Classificazione dei carboni ed idrogeni



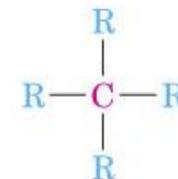
Il carbonio *primario* (1°) è legato ad un altro atomo di carbonio



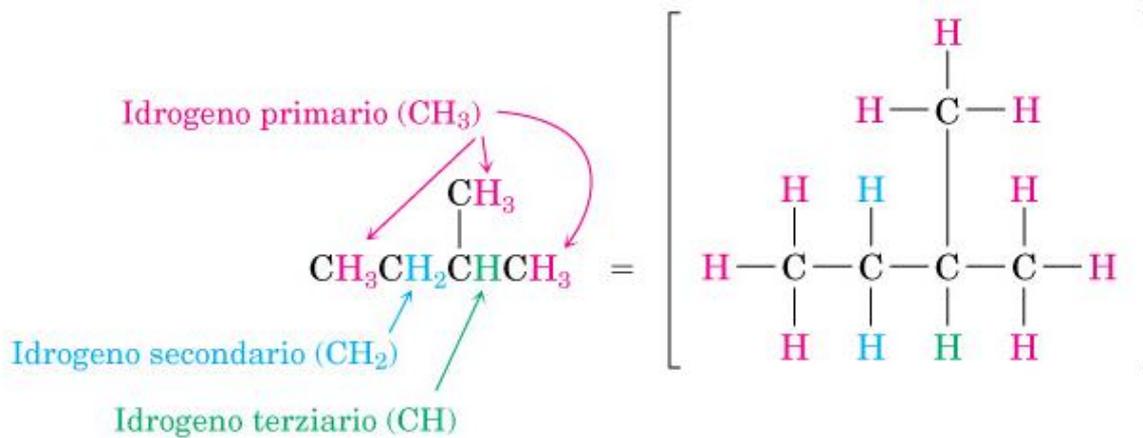
Il carbonio *secondario* (2°) è legato ad altri due atomi di carbonio



Il carbonio *terziario* (3°) è legato ad altri tre atomi di carbonio

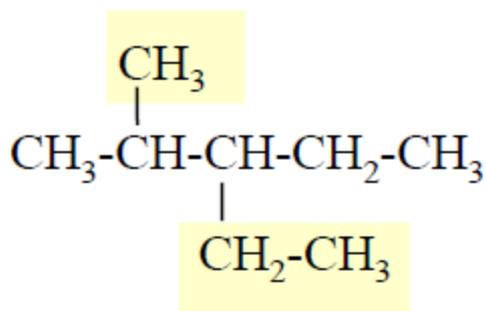


Il carbonio *quaternario* (4°) è legato ad altri quattro atomi di carbonio

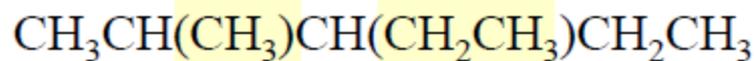


# Scrittura condensata

- Anche strutture complesse possono essere scritte su una sola riga, usando le parentesi per racchiudere un gruppo.

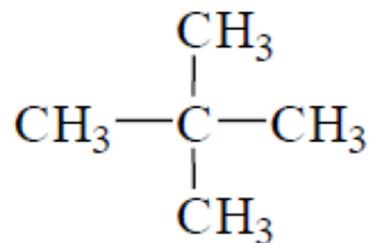
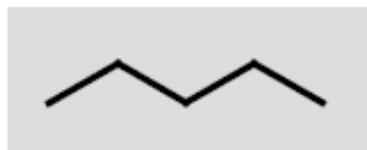
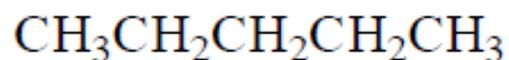
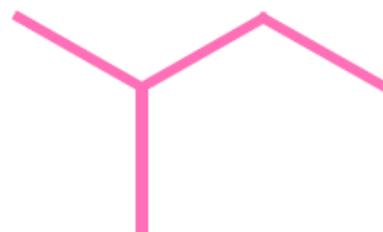


Alcano  
ramificato



# Scrittura a scheletro

- Minima informazione ma non ambigua
- I carboni non sono mostrati, si assume che siano all'intersezione di due o più linee e al termine di ogni linea
- Gli idrogeni non sono mostrati
- Tutti gli atomi diversi da C e H sono mostrati



# Isomeria costituzionale o strutturale

- Isomeri costituzionali sono molecole che hanno lo stesso tipo e numero di atomi (stessa formula) ma legati tra loro in modo diverso.
- Non possono interconvertirsi se non rompendo e riformando legami
- Tutte le proprietà fisiche degli isomeri costituzionali sono differenti:
  - punti di fusione, punti di ebollizione, densità, solubilità, etc.

# Isomeria costituzionale

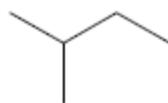
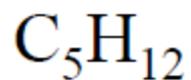
Formula Molecolare	Isomeri Costituzionali
$\text{CH}_4$	1
$\text{C}_5\text{H}_{12}$	3
$\text{C}_{10}\text{H}_{22}$	75
$\text{C}_{15}\text{H}_{32}$	4 347
$\text{C}_{30}\text{H}_{62}$	4 111 846 763

Come trovare gli  
isomeri costituzionali

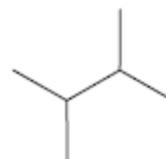
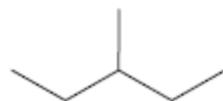
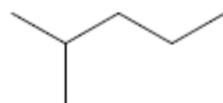
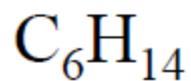
# Esempi



2 isomeri



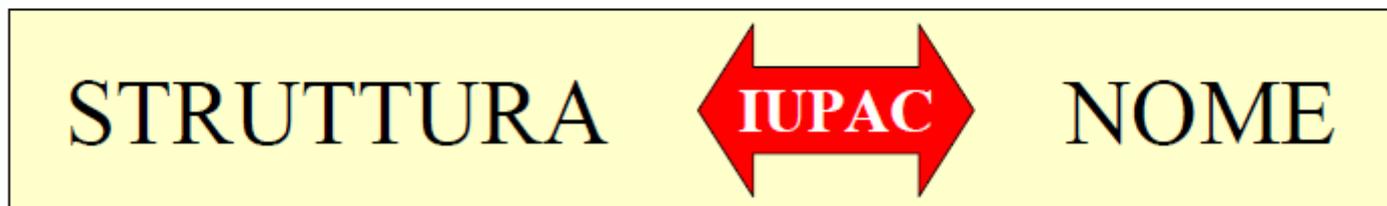
3 isomeri



5 isomeri

# Nomenclatura IUPAC

- È un sistema nel quale ogni composto ha un suo nome.
- Seguendo le regole, chiunque assegna a un dato composto il medesimo nome.
- Viceversa, dato il nome di un composto, ognuno è in grado di disegnare il composto.



# **Nomenclatura degli alcani lineari**

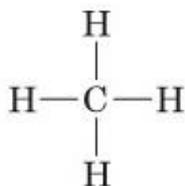
prefisso + infisso + suffisso

a) numero di carboni (but-, pent- ecc.)

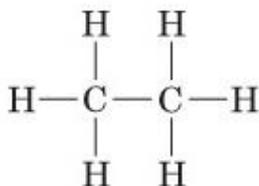
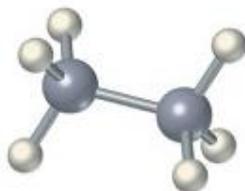
b) No presenza di doppi o tripli legami (an-,)

c) classe chimica e desinenza relativa (-o, )

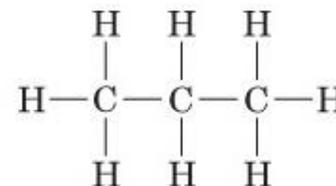
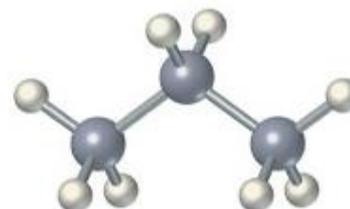
## Costruzione del nome



Met-an-o



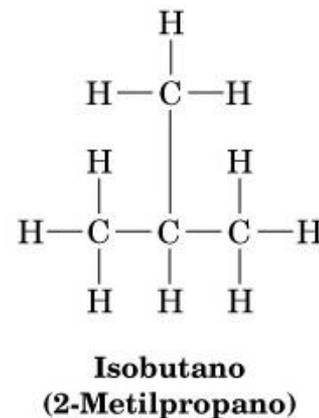
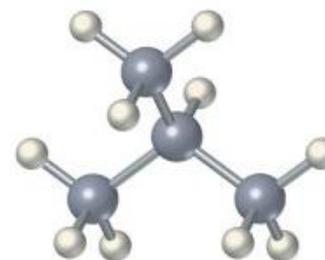
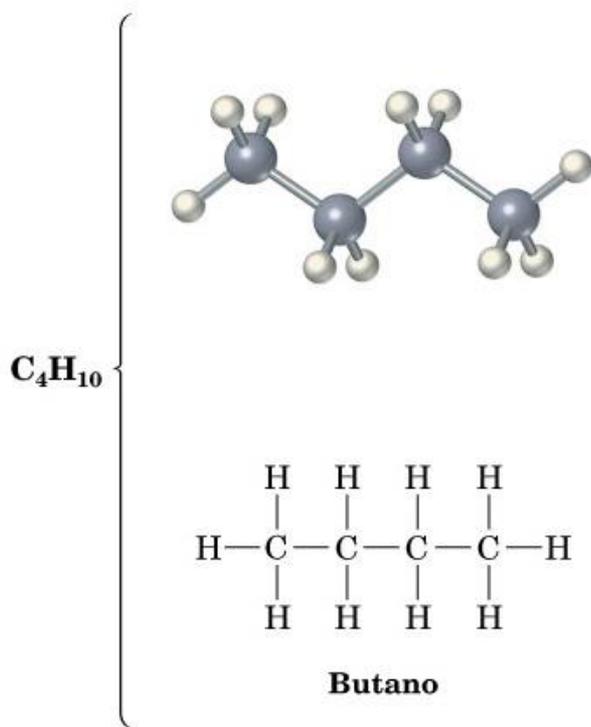
Et-an-o



Prop-an-o

CH <sub>4</sub>	C1	metano	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CH <sub>3</sub>	C7	eptano	<i>n</i> -C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	C13	tridecano
CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	C2	etano	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>6</sub> CH <sub>3</sub>	C8	ottano	<i>n</i> -C <sub>14</sub> H <sub>30</sub>	C14	tetradecano
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	C3	propano	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CH <sub>3</sub>	C9	nonano	<i>n</i> -C <sub>20</sub> H <sub>42</sub>	C20	icosano
CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	C4	butano	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> CH <sub>3</sub>	C10	decano	<i>n</i> -C <sub>30</sub> H <sub>62</sub>	C30	triacontano
CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	C5	pentano	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> CH <sub>3</sub>	C11	undecano	<i>n</i> -C <sub>40</sub> H <sub>82</sub>	C40	tetracontano
CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> CH <sub>3</sub>	C6	esano	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>10</sub> CH <sub>3</sub>	C12	dodecano			etc.

I nomi IUPAC devono rappresentare un'unica possibile struttura chimica e distinguere tra **isomeri**



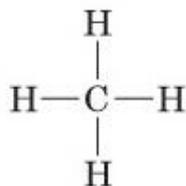
**Alcano lineare**

**Alcano ramificato**

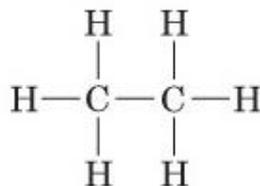
# Alcani ramificati

R = Sostituente alchilico

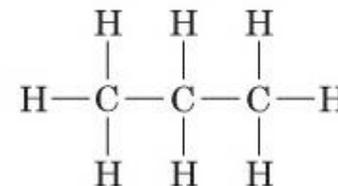
alcano



Metano, CH<sub>4</sub>

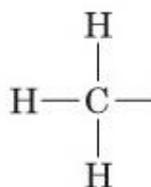


Etano, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>

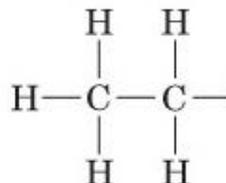


Propano, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>

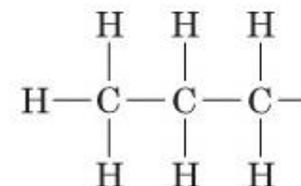
Sostituente  
alchilico



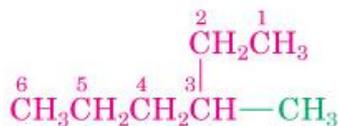
Metile



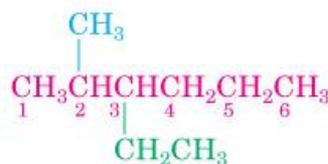
Etile



Propile



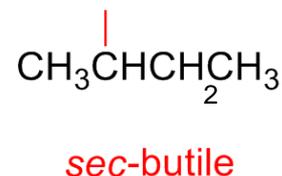
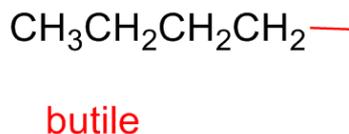
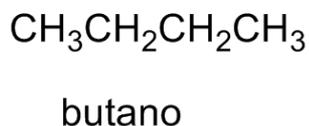
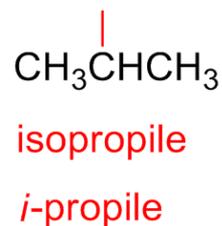
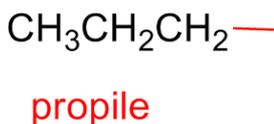
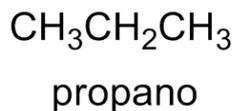
3-Metilesano



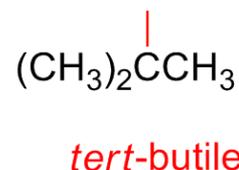
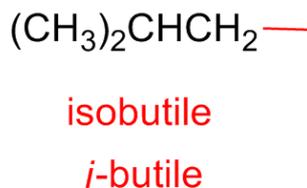
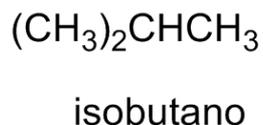
3-Etil-2-metilesano

# Alcani ramificati

R = Sostituenti alchilici e sostituenti alchilici ramificati

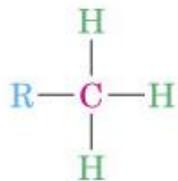


Sec = secondario

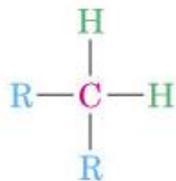


tert- o terz- = terziario

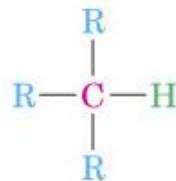
# Classificazione dei carboni ed idrogeni



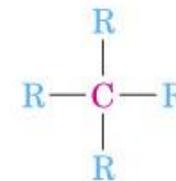
Il carbonio *primario* (1°) è legato ad un altro atomo di carbonio



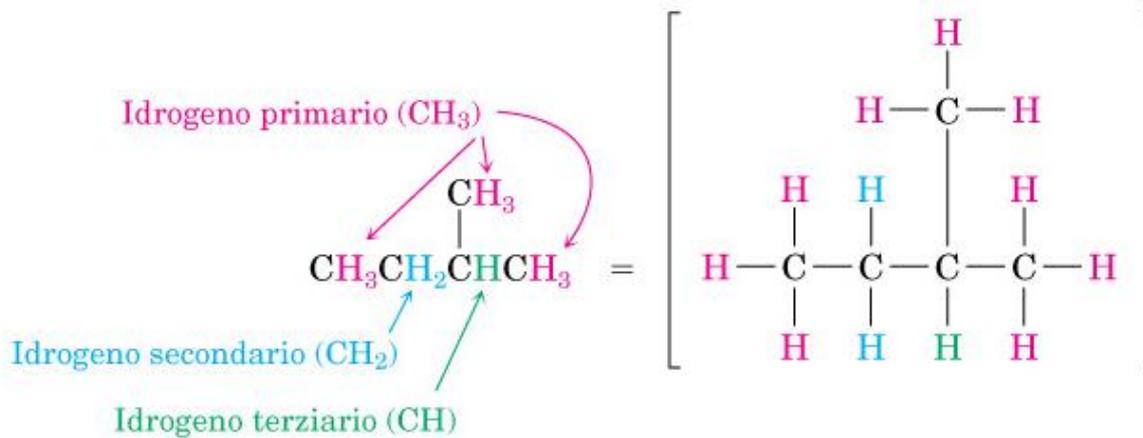
Il carbonio *secondario* (2°) è legato ad altri due atomi di carbonio



Il carbonio *terziario* (3°) è legato ad altri tre atomi di carbonio



Il carbonio *quaternario* (4°) è legato ad altri quattro atomi di carbonio



# NOMENCLATURA degli ALCANI

## Costruzione del nome

prefisso + infisso + suffisso

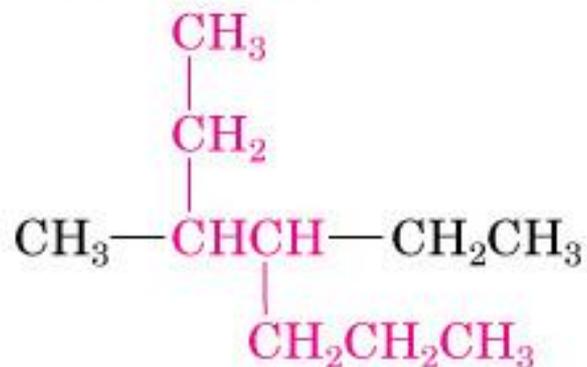
### Identificazione catena principale negli alcani

a) deve contenere il numero massimo di carboni

b) deve contenere il numero massimo di sostituenti

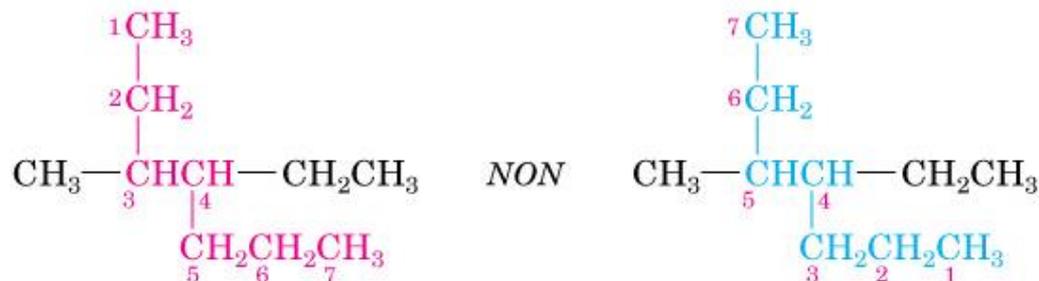


Denominato come un **esano** sostituito



Denominato come un **eptano** sostituito

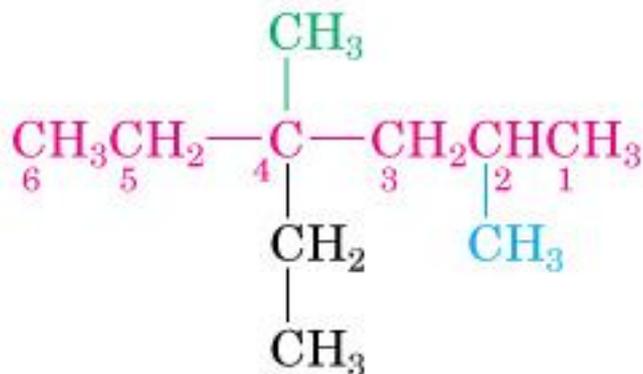
4-etil-3-metileptano



3-etil-4,7-dimetilnonano

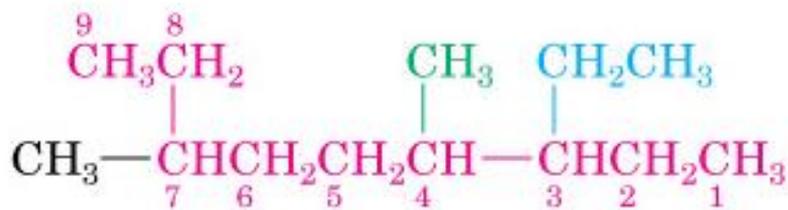
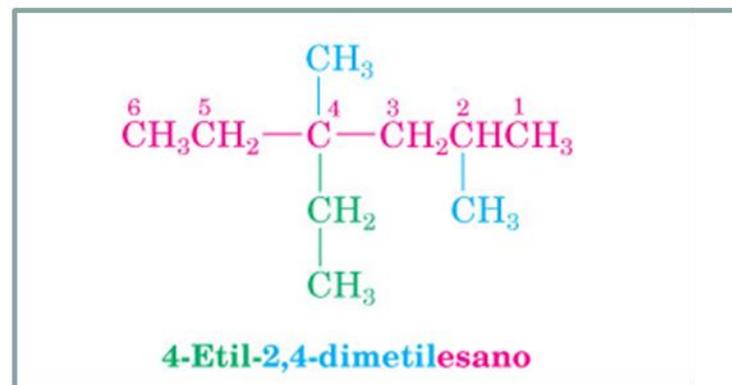
## Numerazione catena principale negli alcani

- si attribuisce il numero più basso al sostituito incontrato per primo
- se non è discriminante si opera la scelta in funzione dell'ordine alfabetico



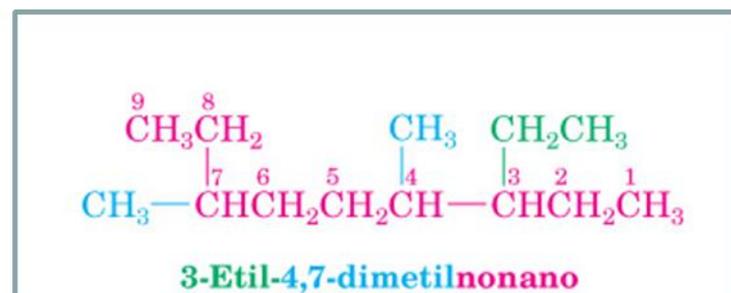
Denominato come un esano

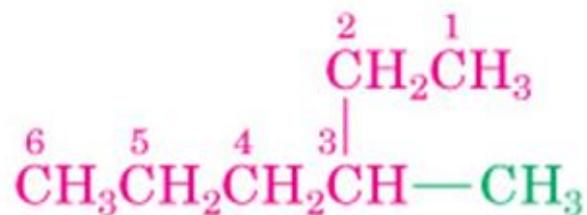
Sostituenti:      Su C2, CH<sub>3</sub>      (2-metil)  
                          Su C4, CH<sub>3</sub>      (4-metil)  
                          Su C4, CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>      (4-etil)



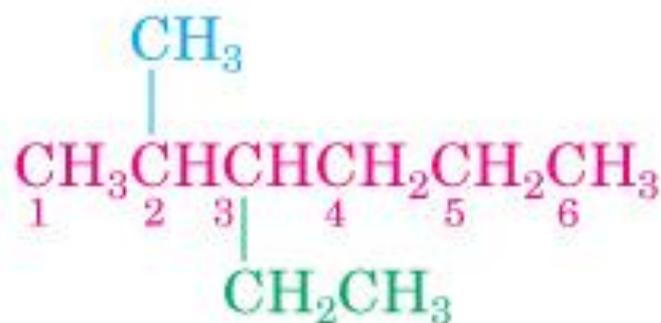
Denominato come un nonano

Sostituenti:      Su C3, CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>      (3-etil)  
                          Su C4, CH<sub>3</sub>      (4-meti  
                          Su C7, CH<sub>3</sub>      (7-meti

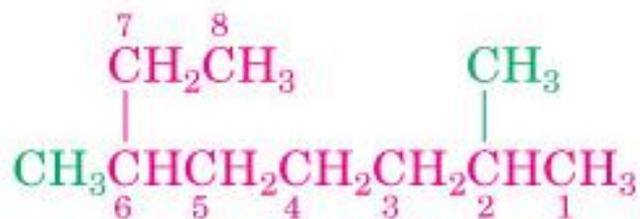




**3-Metilesano**

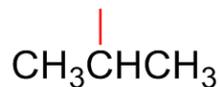


**3-Etil-2-metilesano**



**2,6-Dimetilottano**

# Sostituenti alchilici ramificati complessi

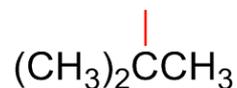


isopropile

*i*-propile



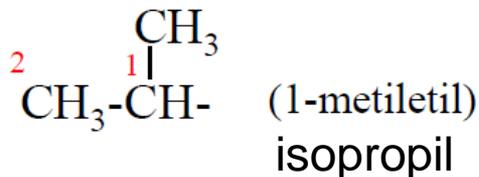
*sec*-butile



*tert*-butile

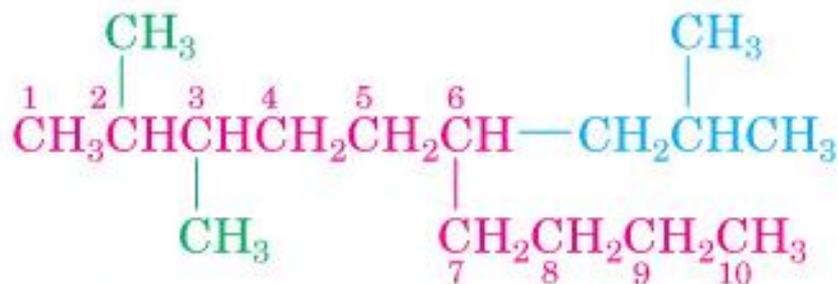
## Sostituenti complessi

1. Assegnare il numero 1 al carbonio del sostituente legato alla catena principale.
2. Numerare la catena di atomi di carbonio verso l'esterno prendendo la catena più lunga. Dare il nome alla catena alchilica con suffisso **-ile**
3. (Se c'è un doppio legame alchile diventa alchenile)
4. Aggiungere i sostituenti con i loro numeri.

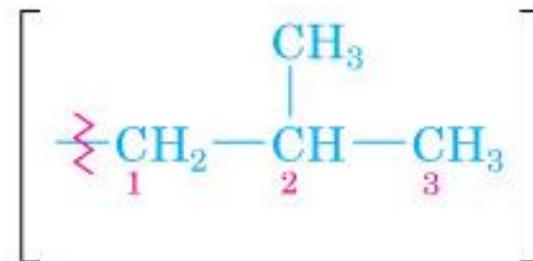


I gruppi complessi sono posti in parentesi.

# Sostituenti alchilici ramificati complessi

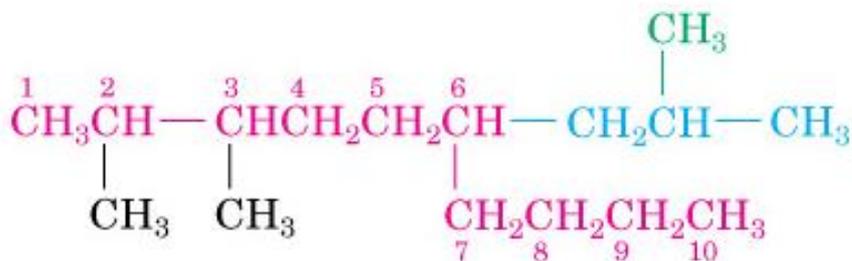


Denominato come un decano  
2,3,6-trisostituito



Gruppo 2-metilpropile

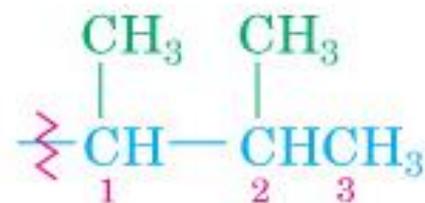
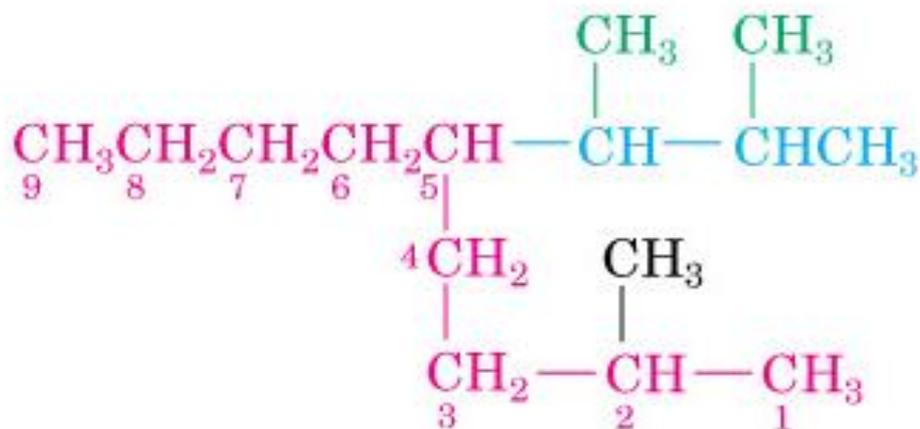
isobutil



2,3-Dimetil-6-(2-metilpropil)decano

## Sostituenti complessi

1. Assegnare il numero 1 al carbonio del sostituente legato alla catena principale.
2. Numerare la catena di atomi di carbonio verso l'esterno prendendo la catena più lunga. Dare il nome alla catena alchilica con suffisso **-ile**
3. (Se c'è un doppio legame alchile diventa alch**en**ile)
4. Aggiungere i sostituenti con i loro numeri.



**5-(1,2-Dimetilpropil)-**

**5-(1,2-Dimetilpropil)-2-metilnonano**

## Sostituenti complessi

1. Assegnare il numero 1 al carbonio del sostituente legato alla catena principale.
2. Numerare la catena di atomi di carbonio verso l'esterno prendendo la catena più lunga. Dare il nome alla catena alchilica con suffisso **-ile**
3. (Se c'è un doppio legame alchile diventa alchen**ile**)
4. Aggiungere i sostituenti con i loro numeri.

# Nomenclatura cicloalcani



MA

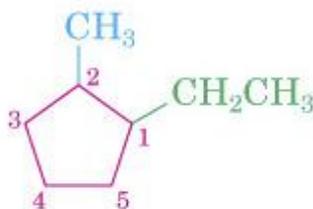


3 atomi di  
carbonio

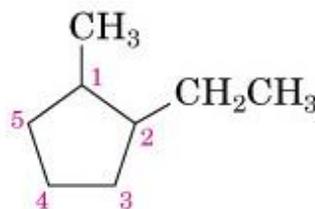
4 atomi di  
carbonio

**Metilciclopentano**

**1-Ciclopropilbutano**



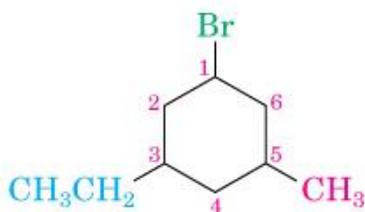
NON



**1-Etil-2-metilciclopentano**

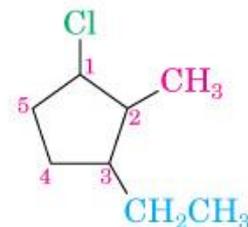
**2-Etil-1-metilciclopentano**

Numero più basso al C che porta il sostituito che viene prima in ordine alfabetico



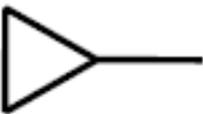
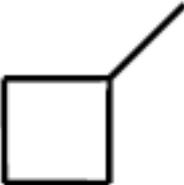
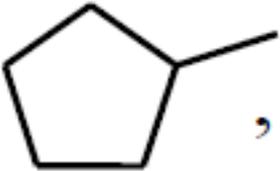
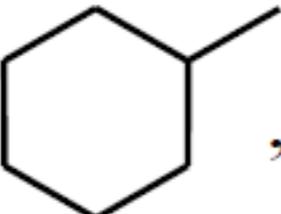
**1-Bromo-3-etil-5-metil-cicloesano**

Se ci sono più sostituenti: assegnare complessivamente i numeri più bassi ai C.



**1-Cloro-3-etil-2-metil-ciclopentano**

## Sostituenti cicloalchilici

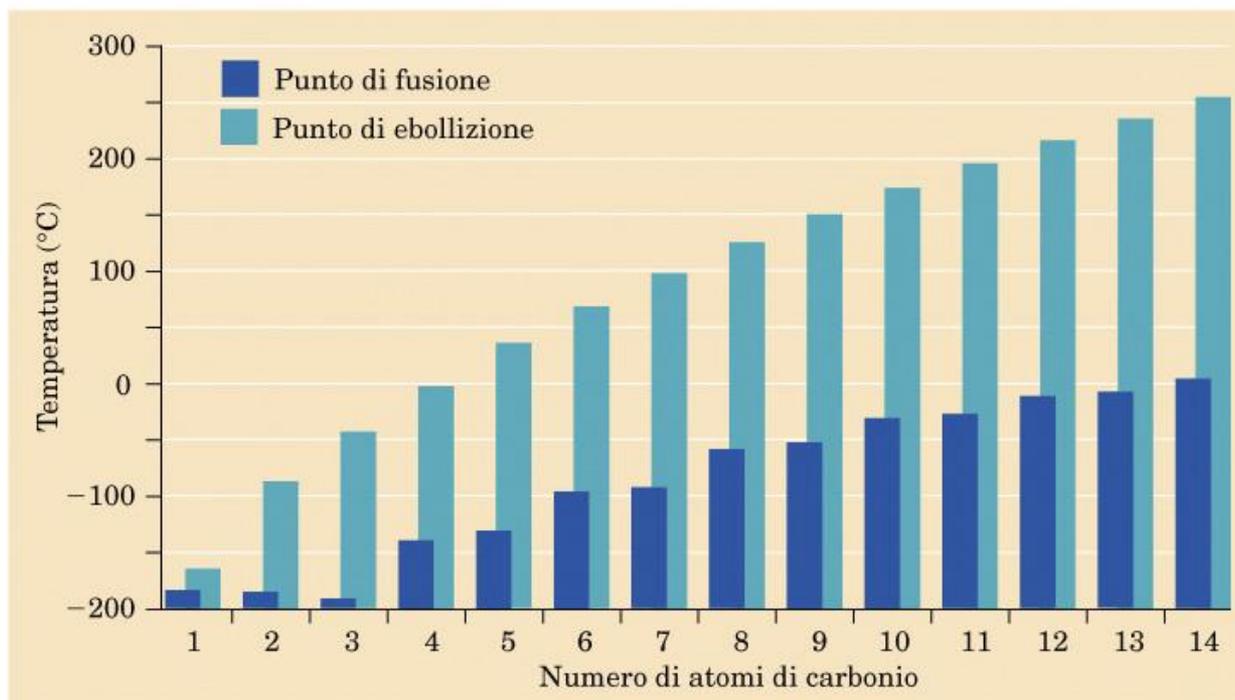
-  , ciclopropile;  , ciclobutile;
-  , ciclopentile;  , cicloesile

# Proprietà degli alcani

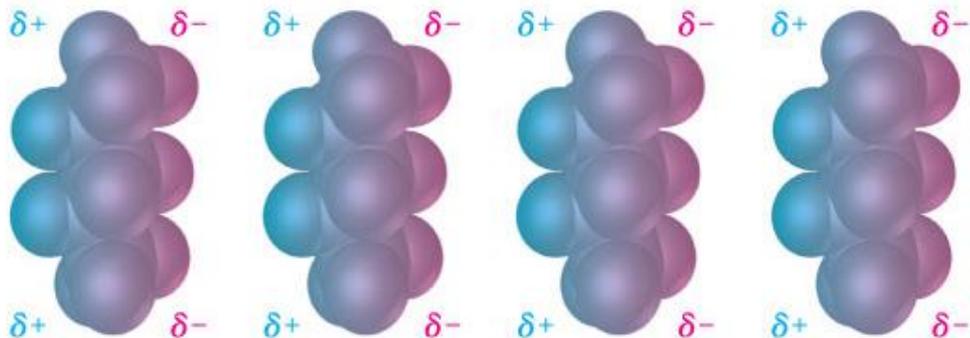
- Molecole apolari e poco reattive
- Apolari e quindi insolubili in acqua
- Apolari e quindi caratterizzate da deboli interazioni intermolecolari

# Proprietà chimico fisiche degli alcani

**FIGURA 3.4** Diagramma del punto di fusione e del punto di ebollizione in funzione del numero di atomi di carbonio negli alcani da  $C_1$ – $C_{14}$ . Si noti l'incremento regolare dei valori in relazione alla dimensione della molecola.



**FIGURA 3.5** La causa delle forze dispersive di tipo attrattivo sono i dipoli temporanei nelle molecole, come si può vedere in questi modelli space-filling del pentano.



## **GPL: Gas di petrolio liquefatti**

Propano e butano, con  
occasionale presenza di piccole  
quantità di etano

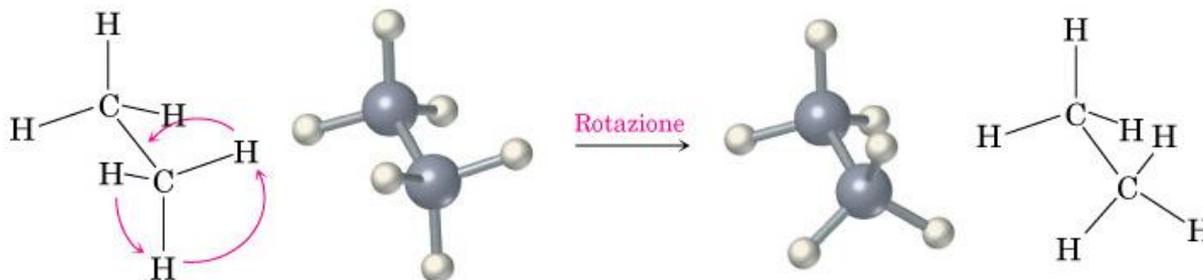
vengono liquefatti mediante  
compressione a pressioni  
relativamente modeste,  
comprese tra 2 e 8 bar, per  
ridurre l'ingombro e rendere più  
economico il trasporto



# Conformazioni degli alcani e cicloalcani

**LE CONFORMAZIONI (CONFORMERI) DEGLI ALCANI SONO IL RISULTATO DI ROTAZIONI DEGLI ATOMI ATTORNO A LEGAMI SIGMA**

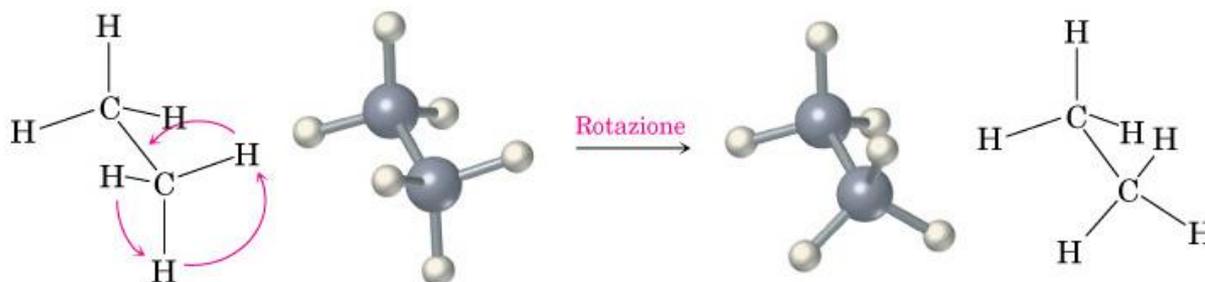
**FIGURA 4.1** Due conformazioni dell'etano. I differenti conformeri si interconvertono per rotazione attorno al legame C—C.



# Quale conformazione sarà più probabile? La più stabile, cioè a bassa energia

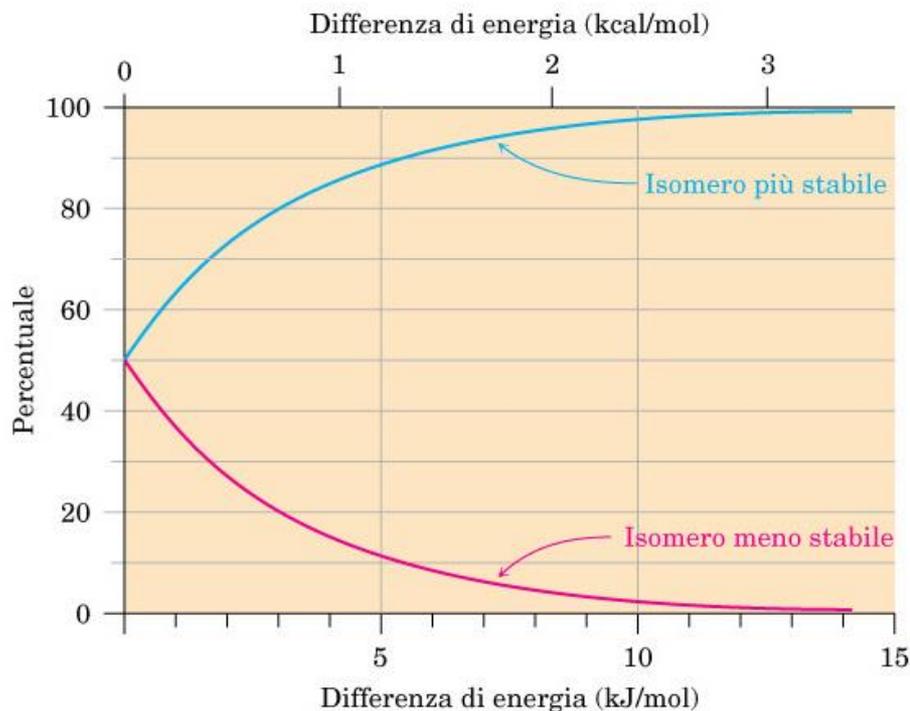
## Le diverse conformazioni sono in equilibrio tra loro

**FIGURA 4.1** Due conformazioni dell'etano. I differenti conformeri si interconvertono per rotazione attorno al legame C—C.



**FIGURA 4.18** Grafico delle percentuali all'equilibrio dei due isomeri in funzione della loro differenza di energia. Le curve sono calcolate usando l'equazione  $\Delta E = -RT \ln K$ .

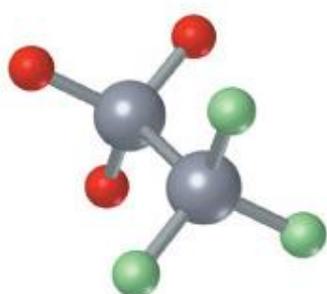
$$K = \frac{[\text{Conf. B}]}{[\text{Conf. A}]}$$



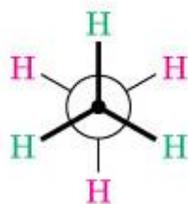
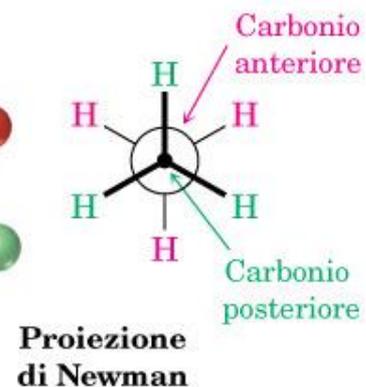
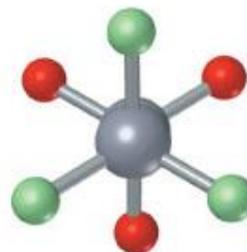
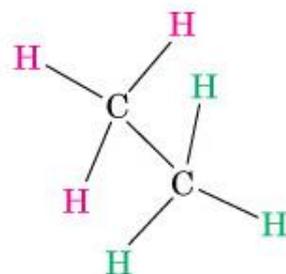
# **Come rappresentare la tridimensionalità delle conformazioni: le proiezioni**

<https://www.youtube.com/watch?v=jUqb-KD9SuY>

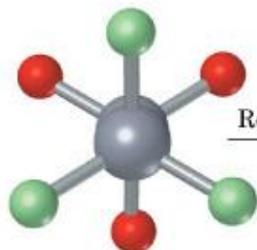
# Le proiezioni di Newman



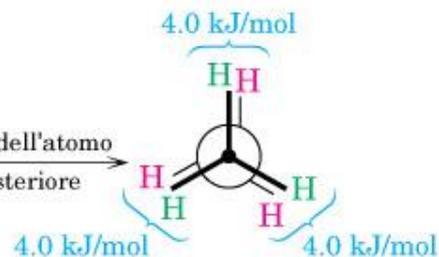
Rappresentazione  
a cavalletto



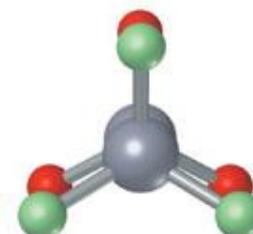
Etano: conformazione  
sfalsata

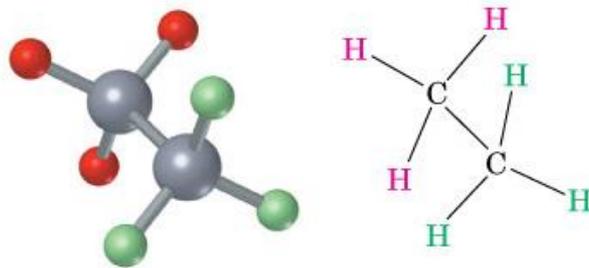


Rotazione di 60° dell'atomo  
di carbonio posteriore

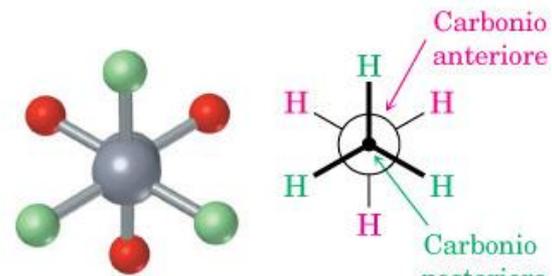


Etano: conformazione  
eclissata





**Rappresentazione a cavalletto**



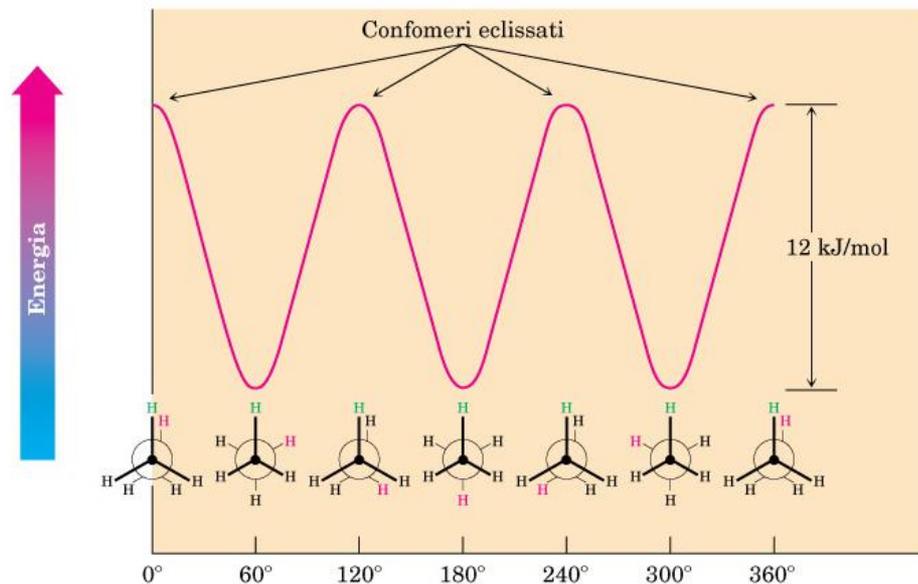
**Proiezione di Newman**



**Etano: conformazione sfalsata**

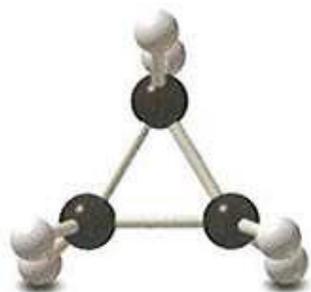
**Etano: conformazione eclissata**

**FIGURA 4.3** Grafico dell'energia potenziale in funzione dell'angolo diedro nell'etano. Le conformazioni sfalsate sono più stabili delle conformazioni eclissate di 12 kJ/mol.

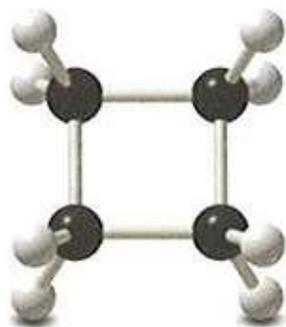




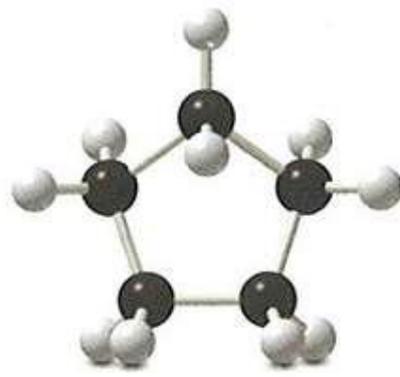
## Cicloalcani semplici



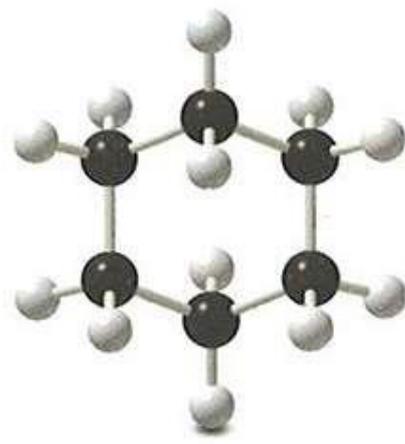
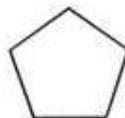
ciclopropano  
 $C_3H_6$



ciclobutano  
 $C_4H_8$



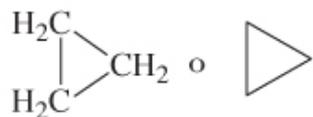
ciclopentano  
 $C_5H_{10}$



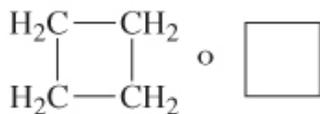
cicloesano  
 $C_6H_{12}$



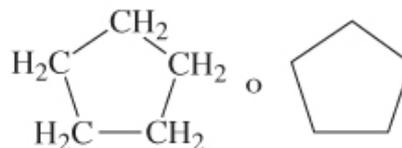
# Cicloalcani



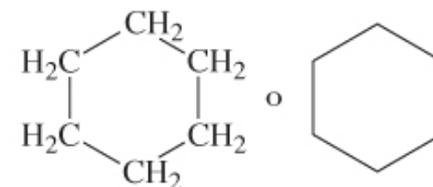
**Ciclopropano**  
 $\text{C}_3\text{H}_6$



**Ciclobutano**  
 $\text{C}_4\text{H}_8$



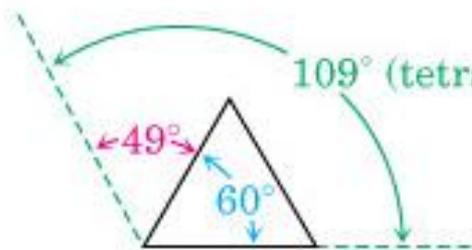
**Ciclopentano**  
 $\text{C}_5\text{H}_{10}$



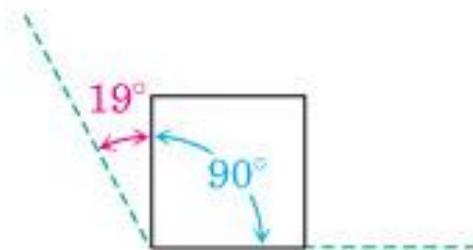
**Cicloesano**  
 $\text{C}_6\text{H}_{12}$

<https://www.youtube.com/watch?v=UqxD6ZVrle8>

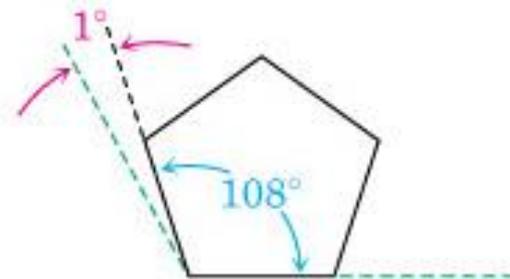
**Tensione angolare e di anello derivante dalla chiusura della catena carboniosa e formazione di un angolo di legame anomalo**



**Ciclopropano**



**Ciclobutano**

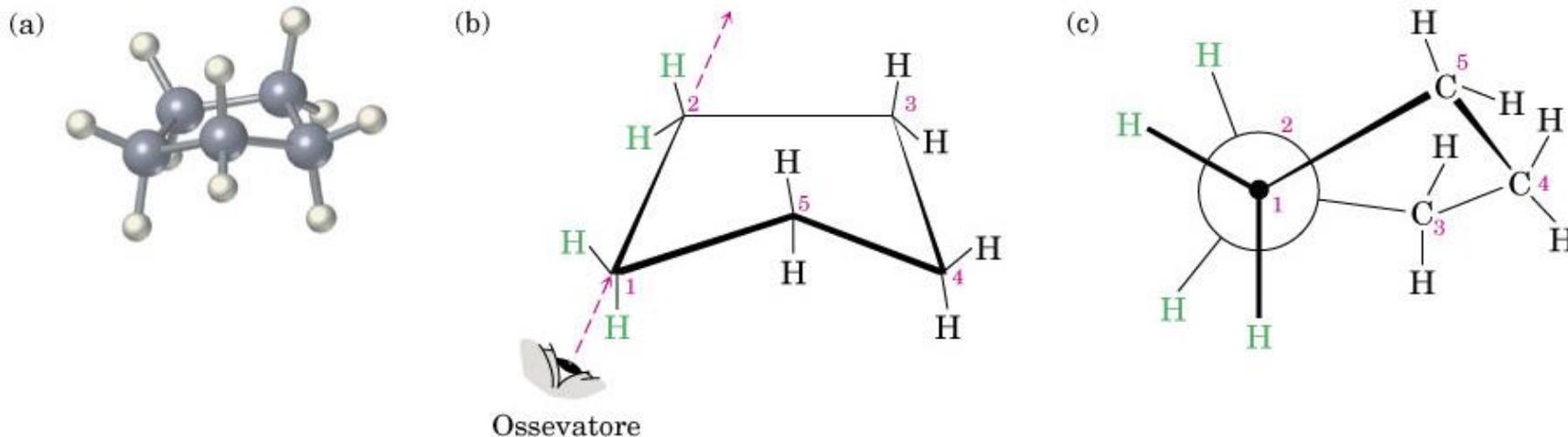


**Ciclopentano**

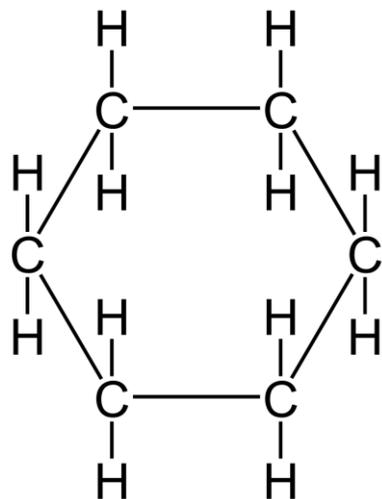
**La chiusura della catena carboniosa determina una restrizione della libertà di ruotare gli atomi attorno ai legami «sigma»**

# CICLOPENTANO: LA CONFORMAZIONE PIU' STABILE E' A BUSTA

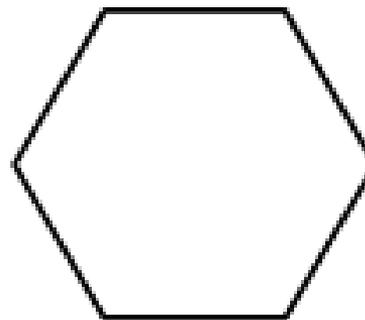
**FIGURA 4.12** Conformazione del ciclopentano. Gli atomi di carbonio 1, 2, 3 e 4 sono pressoché planari, mentre il carbonio 5 è al di fuori del piano. Nella parte (c) la proiezione di Newman rispetto al legame C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub> evidenzia che i legami C-H adiacenti sono pressoché sfalsati.



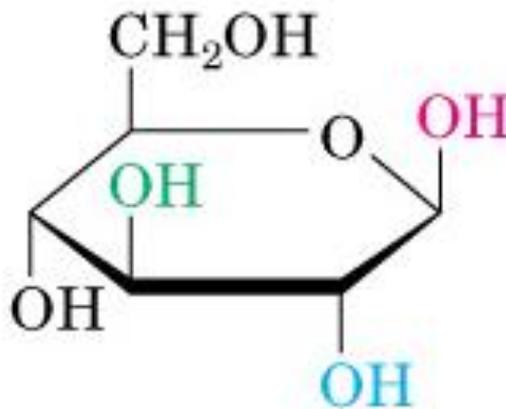
# Perchè è importante comprendere le proprietà conformazionali dei cicli a sei termini?



cicloesano



I cili a sei termini sono molto frequenti nelle molecole naturali e biologicamente attive



Glucosio

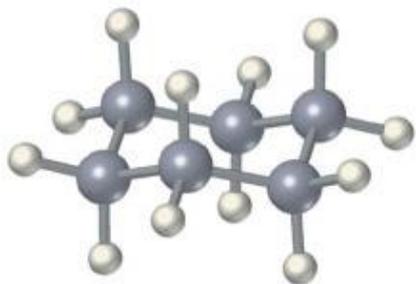
# Cicloesano

La conformazione più stabile è quella a sedia

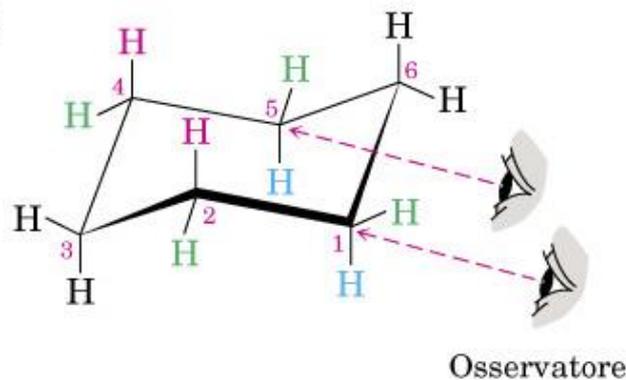
- $111,5^\circ$ : bassa tensione di anello
- Idrogeni sfalsati

**FIGURA 4.13** La conformazione a sedia del cicloesano esente da tensione. Tutti gli angoli di legame C—C—C sono di  $111,5^\circ$  (un valore vicino al valore tetraedico ideale di  $109,5^\circ$ ), e tutti i legami C—H adiacenti sono sfalsati.

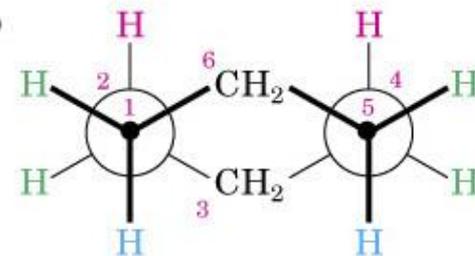
(a)



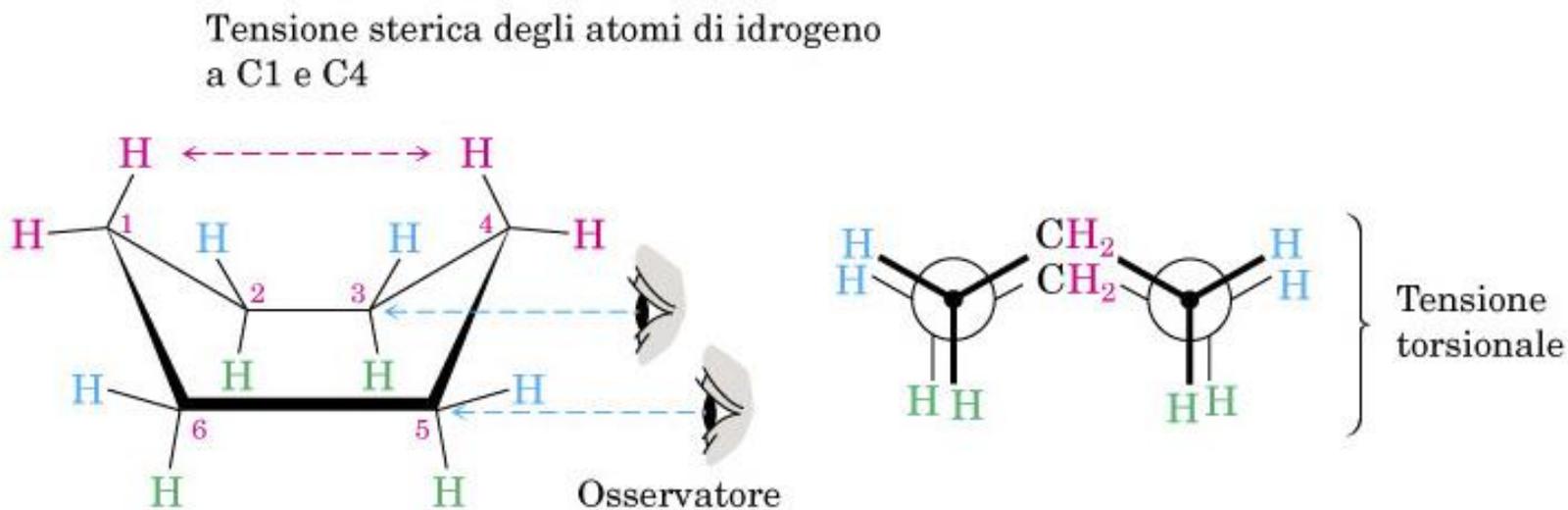
(b)



(c)



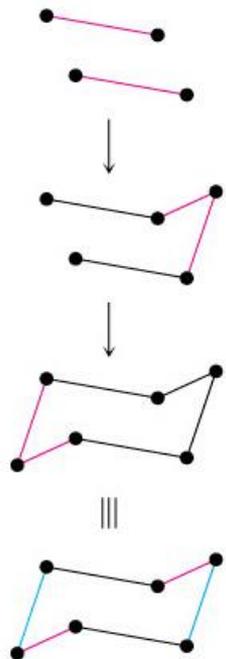
**La conformazione a barca del cicloesano è sfavorita, cioè meno stabile e a più alta energia perché esiste una tenzione di non-legame o sterica tra due H**



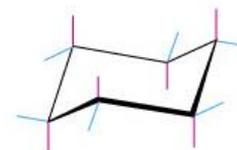
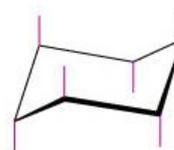
**Differenza di energia tra conf. a sedia e quella a barca = 27kj / mole**

<https://www.youtube.com/watch?v=UqxD6ZVrle8>

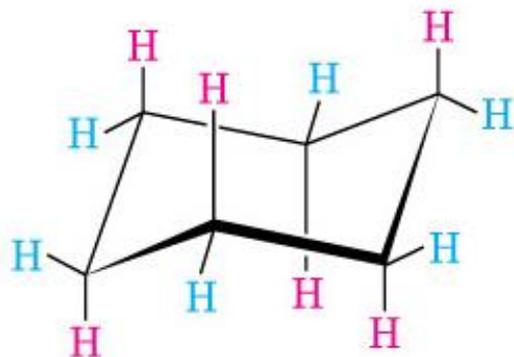
# RAPPRESENTAZIONE DELLA CONFORMAZIONE A SEDIA DEL CICLOESANO



**FIGURA 4.16** Procedimento per disegnare i legami assiali ed equatoriali nel cicloesano a sedia.



Cicloesano completo

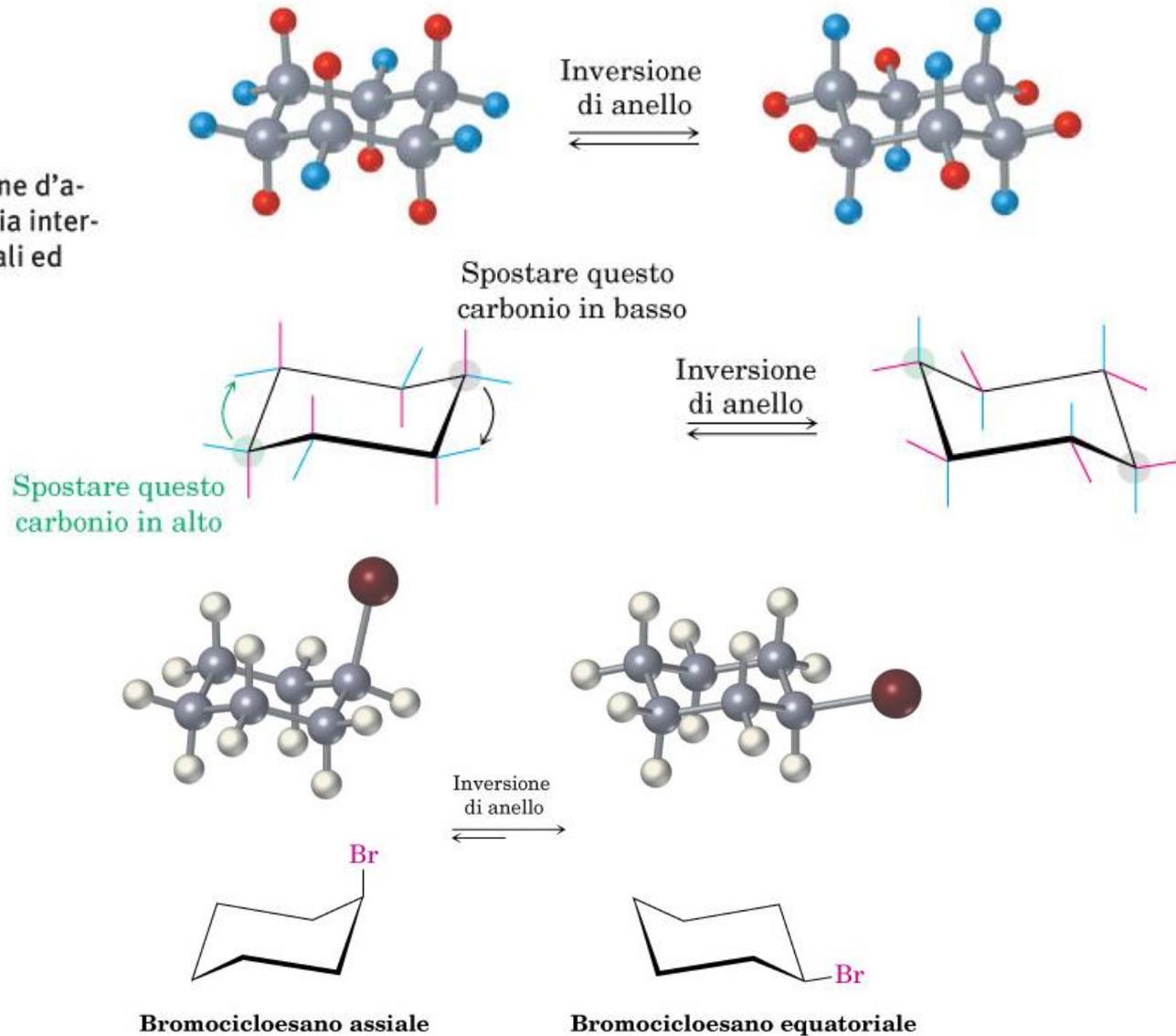


Assiali

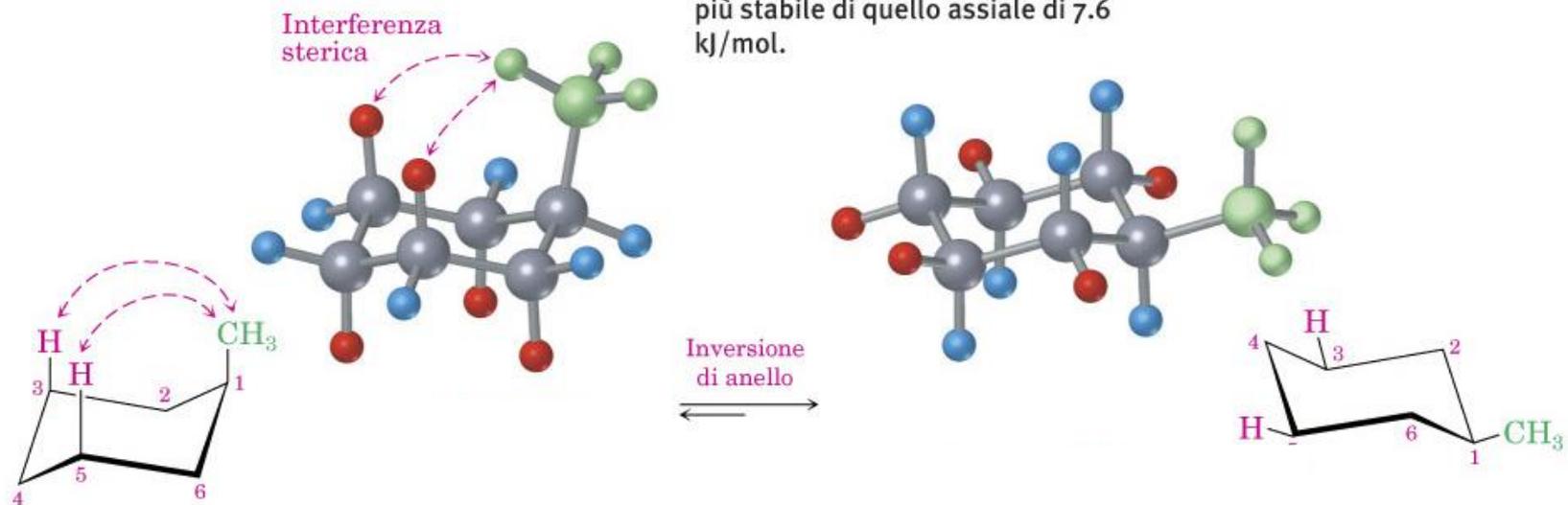
Equatoriali

# ROTAZIONE PARZIALE ATTORNO A LEGAMI SIGMA: LE CONFORMAZIONI SONO IN EQUILIBRIO TRA LORO

**FIGURA 4.17** L'inversione d'anello nel cicloesano a sedia interconverte le posizioni assiali ed equatoriali.



# Rotazione parziale ed interconversione delle due conformazioni a sedia



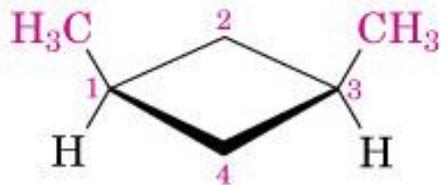
# **STEREOISOMERIA *CIS-TRANS* NEI CICLOALACANI**

# COSA SONO GLI STEREOISOMERI?

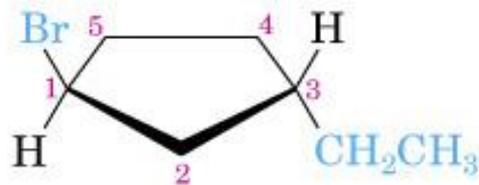
**Isomeri costituzionali**  
(differenti connessioni  
tra gli atomi)



**Stereoisomeri**  
(stesse connessioni tra  
gli atomi ma differente  
orientamento  
tridimensionale)



*cis*-1,3-Dimetilciclobutano

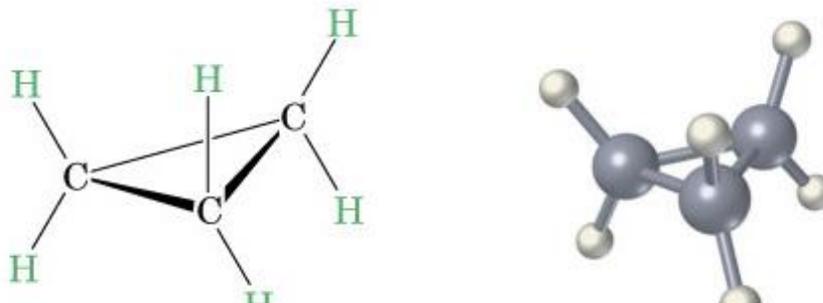


*trans*-1-Bromo-3-etilciclopentano

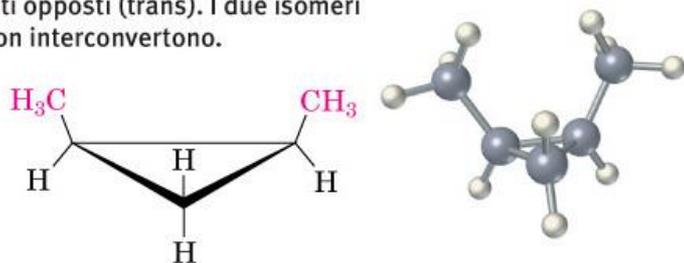
# L'ANELLO CONFERISCE RIGIDITA' ALLA MOLECOLA: LA ROTAZIONE ATTORNO AI LEGAMI C-C E' IMPEDITA.

## Isomeria *cis-trans* nei cicloalcani:

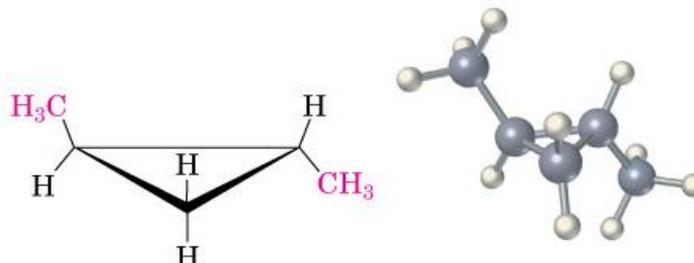
**FIGURA 3.8** Struttura del ciclopropano. La rotazione intorno ai legami carbonio-carbonio non è possibile, a meno che non si rompa l'anello.



**FIGURA 3.9** Esistono due diversi isomeri dell'1,2-dimetilciclopropano, uno con i gruppi metilici dallo stesso lato dell'anello (*cis*), l'altro con i gruppi metilici sui due lati opposti (*trans*). I due isomeri non interconvertono.



*cis*-1,2-Dimetilciclopropano



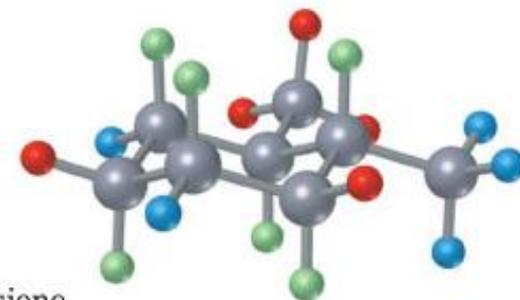
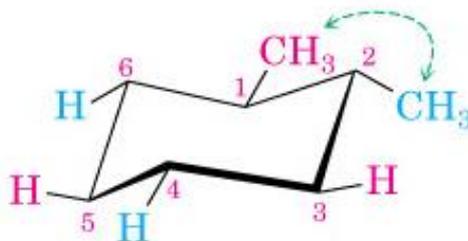
*trans*-1,2-Dimetilciclopropano

Non sono in equilibrio tra loro, non sono diversi conformeri ma  
sono **STEREoisomeri**

# STEREISOOMERO *trans* del 1,2-dimetilcicloesano: QUALE SARA' LA SUA CONFORMAZIONE PIU' STABILE?

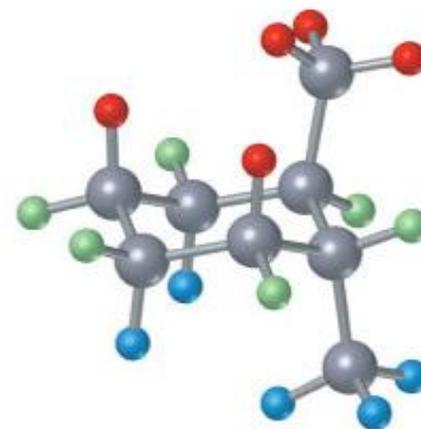
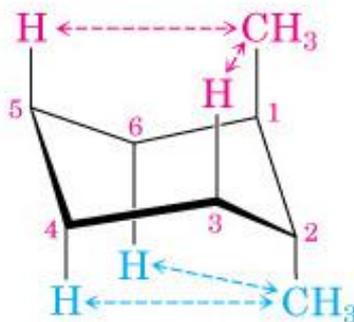
## *trans*-1,2-Dimetilcicloesano

Una interazione  
gauche (3.8 kJ/mol)



↑ Inversione  
di anello  
↓

Quattro interazioni diassali  
CH<sub>3</sub>-H (15.2 kJ/mol)

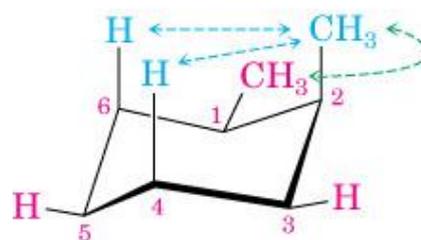


# STEREoisomero *cis* del 1,2-dimetilcicloesano:

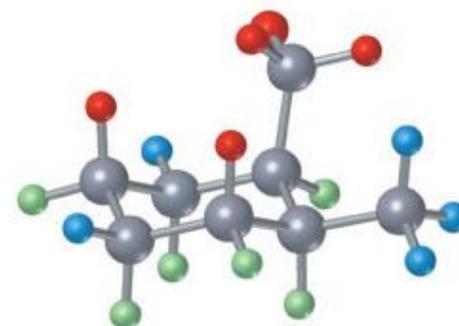
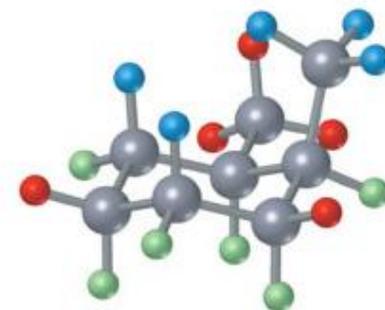
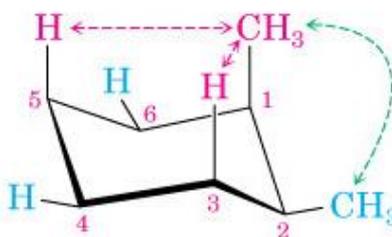
QUALE SARA' LA SUA  
CONFORMAZIONE PIU'  
STABILE?

## *cis*-1,2-Dimetilcicloesano

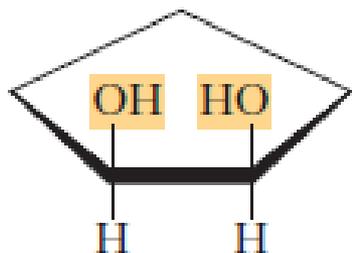
**FIGURA 4.21**  
Conformazioni del *cis*- e del *trans*-1,2-dimetilcicloesano. Nell'isomero *cis* (in alto nella figura) le due conformazioni a sedia hanno la stessa energia, in quanto entrambe posseggono un metile assiale e uno equatoriale. Nell'isomero *trans* (in basso nella figura), la conformazione con i due gruppi metilici in posizione equatoriale è più stabile di 11.4 kJ/mol (2.7 kcal/mol) di quella con i due metili assiali.



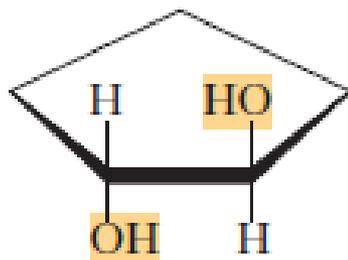
↕ Inversione  
di anello



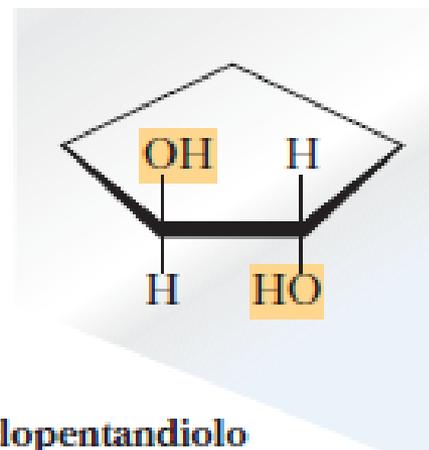
## Proiezioni di Haworth



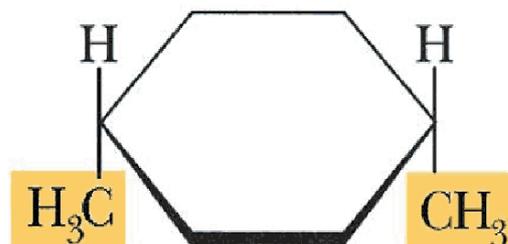
*cis*-1,2-Ciclopentandiolo



*trans*-1,2-Ciclopentandiolo



*trans*-1,4-dimetilcicloesano

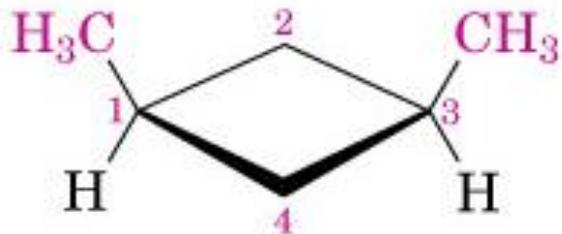
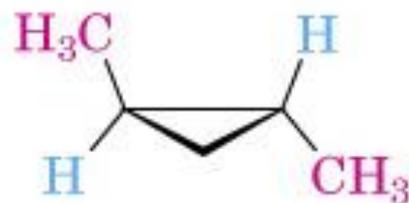


*cis*-1,4-dimetilcicloesano

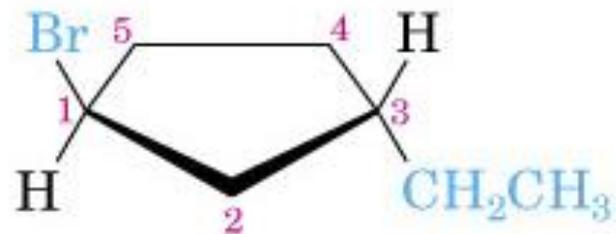
## Proiezioni di Haworth



e

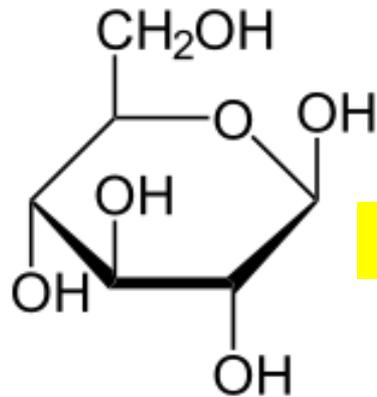


*cis*-1,3-Dimetilciclobutano

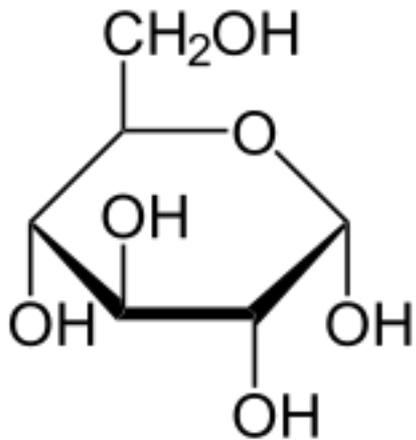
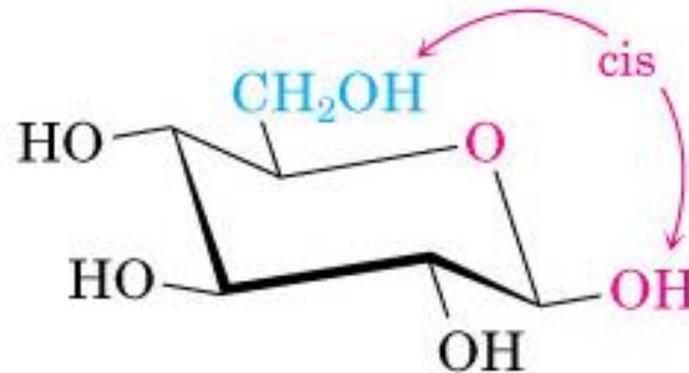


*trans*-1-Bromo-3-etilciclopentano

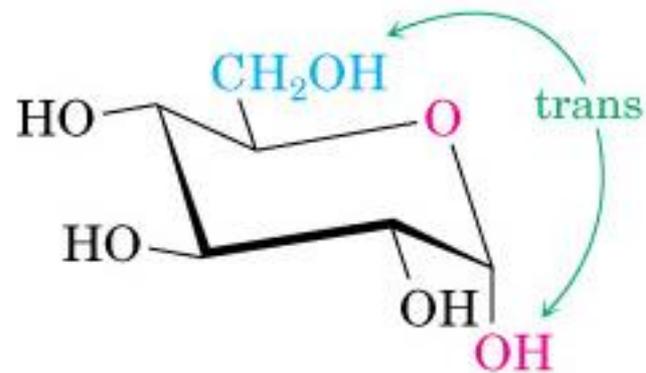
## Confronto tra $\alpha$ -glucosio e $\beta$ -glucosio



$\beta$ -glucosio



$\alpha$ -glucosio



Informazioni sulle fonti di alcani e la  
loro trasformazione nell'industria  
petrolchimica

# 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

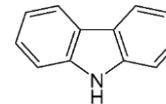
S 0-6

N 0-1

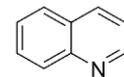
O 0-2



tiofene



carbazolo



chinolina

# Lavorazione del petrolio

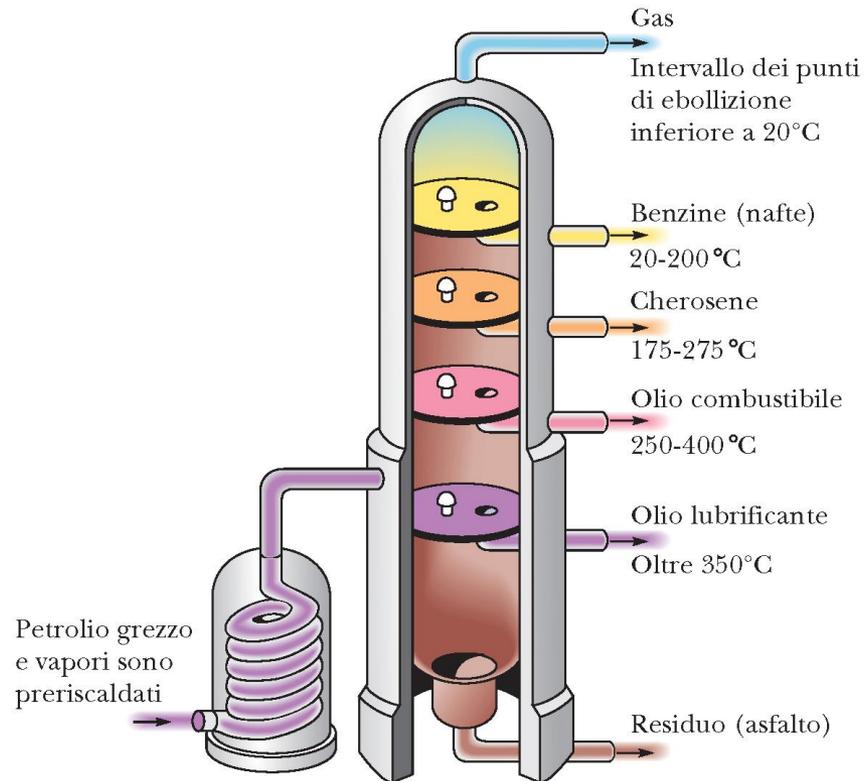
- Comporta tre aspetti:
  - Approvvigionamento di greggio.
  - Conversioni: processi che convertono il greggio in prodotti desiderati (separazione, conversione, rifinitura, etc.) in modo economico e ambientalmente accettabile.
  - Prodotti: sono benzina, diesel, solventi, oli da riscaldamento e oli combustibili,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



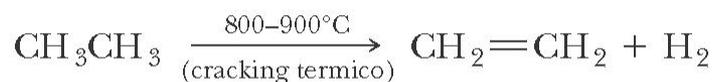
# Raffinerie



**FIGURA 3.13**

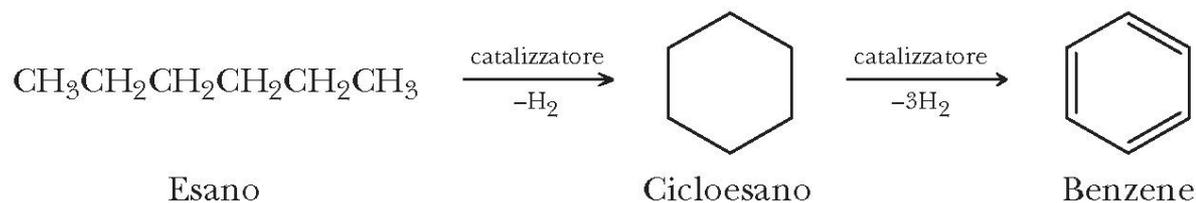
Distillazione frazionata del petrolio. Le frazioni più leggere, più volatili, sono estratte dalla parte superiore della colonna, mentre le frazioni più pesanti, meno volatili, dalla parte inferiore.

# Cracking e reforming catalitico



Etano

Etilene



Esano

Cicloesano

Benzene

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





# The impact of chemical & plastic sectors

---

About 7-10% of fossil oil consumed globally is used for chemistry and plastics

Global daily oil production in 2020:  
88.4 million barrels



1 barrel=159 L

***“The Stone Age didn't end because we ran out of stones”, Yamani, 1973***

Green chemistry and process innovation, since 1991 in EU:  
-chemical production + 94.7%  
-greenhouse gas emissions – 49.6%

**HOWEVER**

**The chemical industry is still responsible for about 7-8% of the global anthropogenic GHG emissions**

## Green Chemistry Pocket Guide

### The 12 Principles of Green Chemistry

Provides a framework for learning about green chemistry and designing or improving materials, products, processes and systems.

1. Prevent waste
2. Atom Economy
3. Less Hazardous Synthesis
4. Design Benign Chemicals
5. Benign Solvents & Auxiliaries
6. Design for Energy Efficiency
7. Use of Renewable Feedstocks
8. Reduce Derivatives
9. Catalysis (vs. Stoichiometric)
10. Design for Degradation
11. Real-Time Analysis for Pollution Prevention
12. Inherently Benign Chemistry for Accident Prevention

[www.acs.org/greenchemistry](http://www.acs.org/greenchemistry)

## 12 Principles of Green Chemistry

Developed by Paul Anastas and John Warner:

the list outlines an early conception of what would make a greener chemical, process, or product.

Anastas, P. T.; Warner, J. C. *Green Chemistry: Theory and Practice*, Oxford University Press: New York, 1998, p.30. B

## Production of waste by various branches of chemical industry



Industry	Product scale (t/year)	Kg waste / Kg product ( <i>E</i> factor)
Oil refining	$10^6$ - $10^8$	$\ll 0.1$
Bulk chemicals	$10^4$ - $10^6$	1-5
Fine chemicals	10- $10^4$	5 - 50
Pharma	1- $10^3$	25 - $> 100$

Sheldon R.A., Green Chemistry, 2007, 9, 1273-1283.

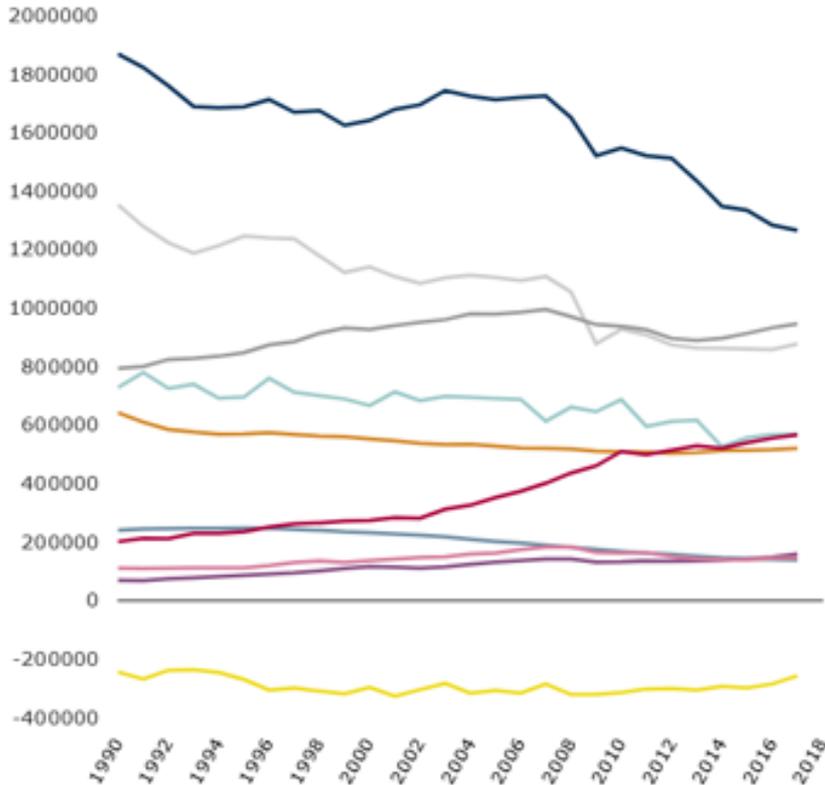


Roger Sheldon

$$E = \text{kgW/kgP}$$

CHEMISTRY ENVOROMENTAL IMPACT!

kt CO<sub>2</sub> equivalent



Legend

- Energy supply
- Industry
- Transport
- Residential/commercial
- Agriculture
- Waste
- International aviation
- International shipping
- CO<sub>2</sub> biomass
- LULUCF
- Total excl. LULUCF

Percentage

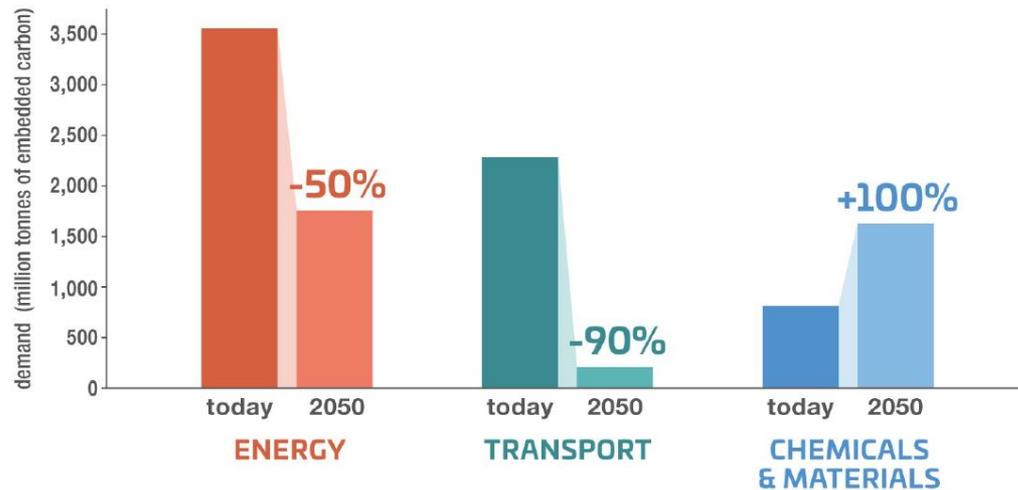


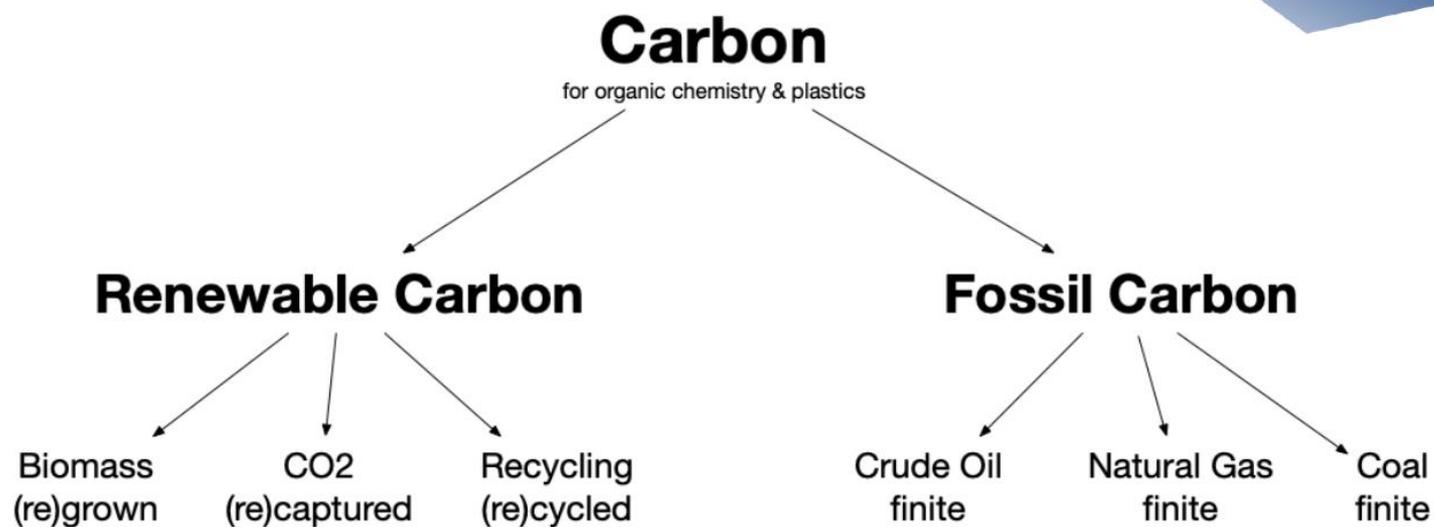
Land Use, Land Use Change and Forestry

# Use of fossil oil

## Embedded Carbon Demand for Main Sector

Today (2015–2020) and Scenario for 2050 (in million tonnes of embedded carbon)





# plastic

Fossil-Based Plastics	Bio-Based Plastics	Recycled Plastics	CO <sub>2</sub> -based Plastics
360 – 380 Million tonnes	4 Million tonnes	20 – 40 Million tonnes	< 500,000 tonnes



A. Pellis, M. Malinconico, A. Guarneri, L. Gardossi *New Biotechnol.* **2021**, *60*, 146-158.

<https://www.oecd.org/environment/plastics/increased-plastic-leakage-and-greenhouse-gas-emissions.htm>  
[https://plasticseurope.org/wp-content/uploads/2022/12/PE-PLASTICS-THE-FACTS\\_FINAL\\_DIGITAL.pdf](https://plasticseurope.org/wp-content/uploads/2022/12/PE-PLASTICS-THE-FACTS_FINAL_DIGITAL.pdf)

# Carbon Embedded in Chemicals and Derived Materials

updated nova scenario for a global net-zero chemical industry in 2050

