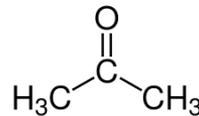


# Classificazione delle molecole organiche e gruppi funzionali

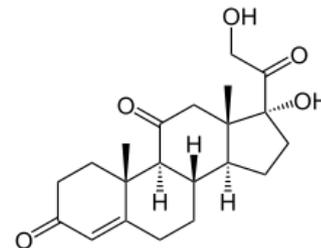
# Gruppo Funzionale (GF)

1. Definisce una classe di composti
  - Composti appartenenti ad una stessa classe hanno **proprietà simili e simile reattività**.
2. È il **sito di reazione**
  - Determina la chimica della molecola, ossia la sua reattività
3. Fornisce una base per la nomenclatura
  - Ad esempio, tutti i chetoni hanno nei loro nomi il suffisso **–one**:

» acetone

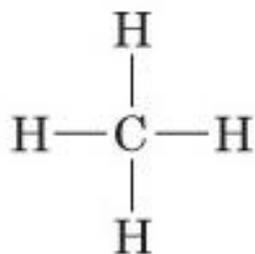


» cortisone

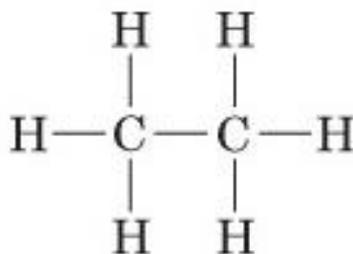


**GLI ALCANI: composti organici che hanno nella loro struttura solo atomi di C o H legati tra di loro attraverso legami «sigma»**

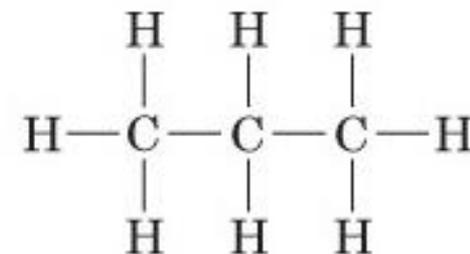
**NON presentano gruppi funzionali**



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

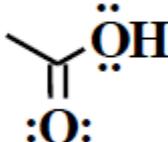
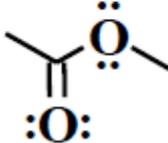
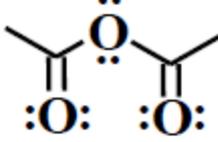
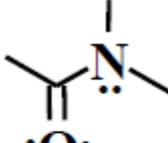
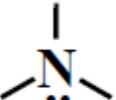
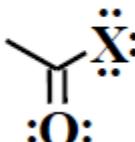
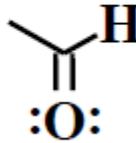
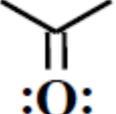
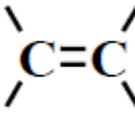
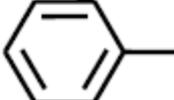


**Etano, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>**



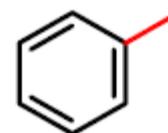
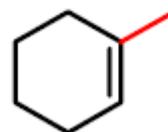
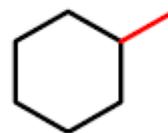
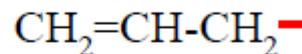
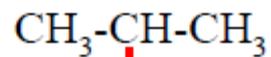
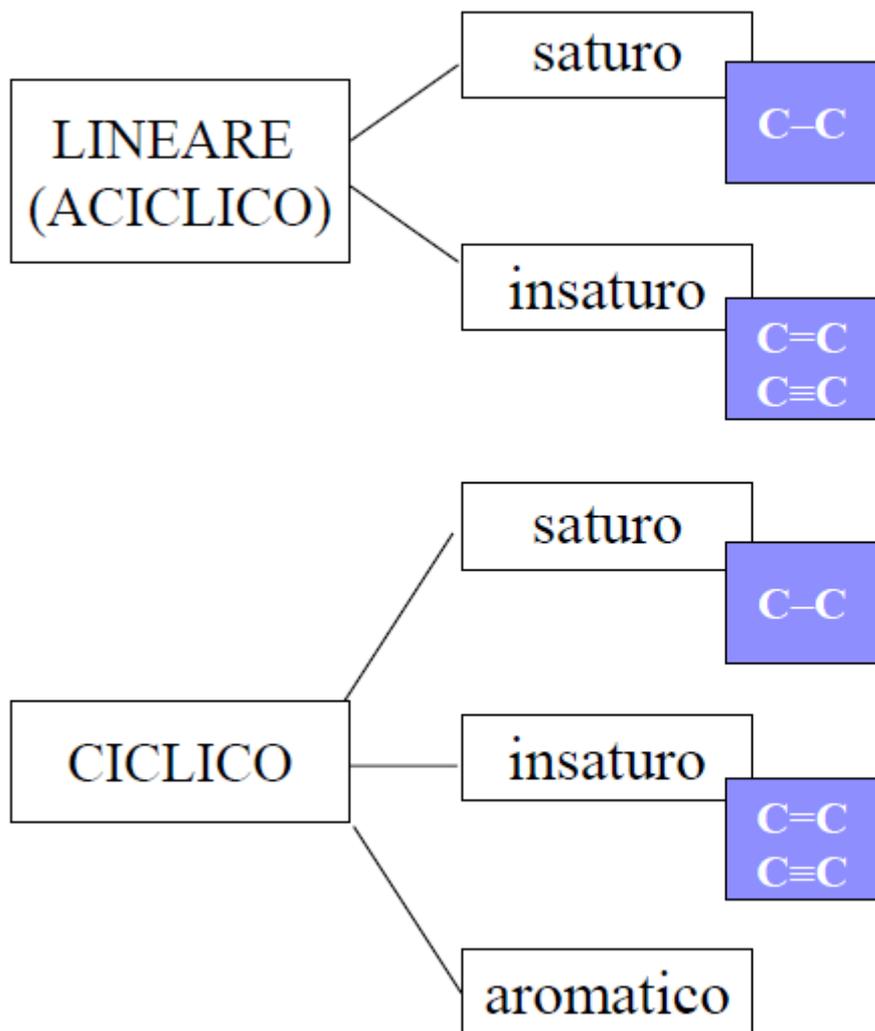
**Propano, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>**

# Comuni Gruppi Funzionali

GF	Classe	GF	Classe
$\text{-}\ddot{\text{X}}\text{:}$	Alogenuri (X = F, Cl, Br, I)		Acidi carbossilici
$\text{-}\ddot{\text{O}}\text{H}$	Alcoli		Esteri carbossilici
$\text{-}\ddot{\text{S}}\text{H}$	Tioli		Anidridi
$\text{-}\ddot{\text{O}}\text{-}$	Eteri		Ammidi
	Ammine		Acil alogenuri (X = Cl, Br)
	Aldeidi	$\text{-C}\equiv\text{N:}$	Nitrili
	Chetoni		Alcheni
		$\text{-C}\equiv\text{C-}$	Alchini
			Areni

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

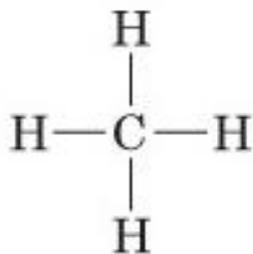
Alifatici: deriva dal greco *aleifar* cioè unguento; questo perché molti grassi contengono lunghe catene carboniose.



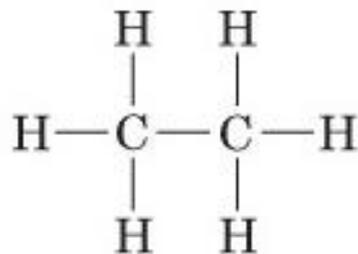
A  
L  
I  
F  
A  
T  
I  
C  
I

AROMATICI

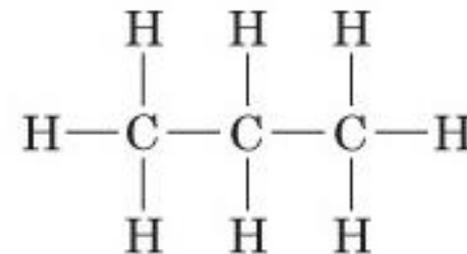
**GLI ALCANI: composti organici, idrocarburi, hanno nella loro struttura solo atomi di C o H legati tra di loro attraverso legami «sigma»**



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



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



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

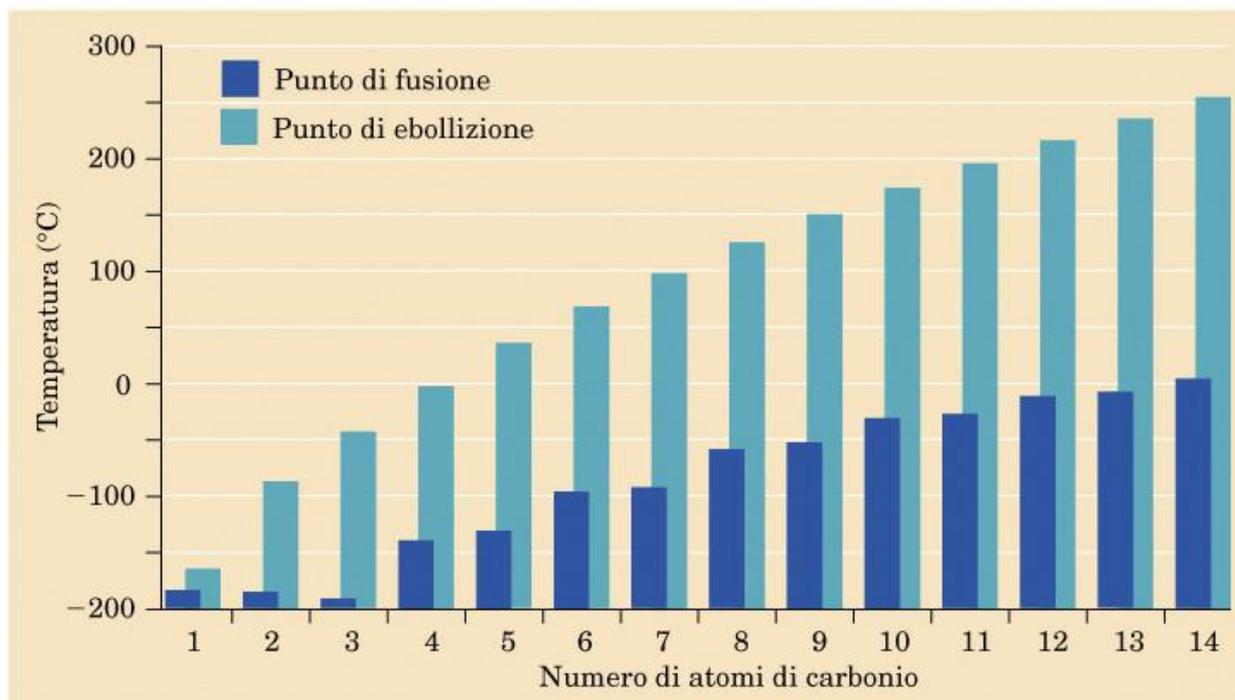
Alcani lineari a basso peso molecolare

# Proprietà degli alcani

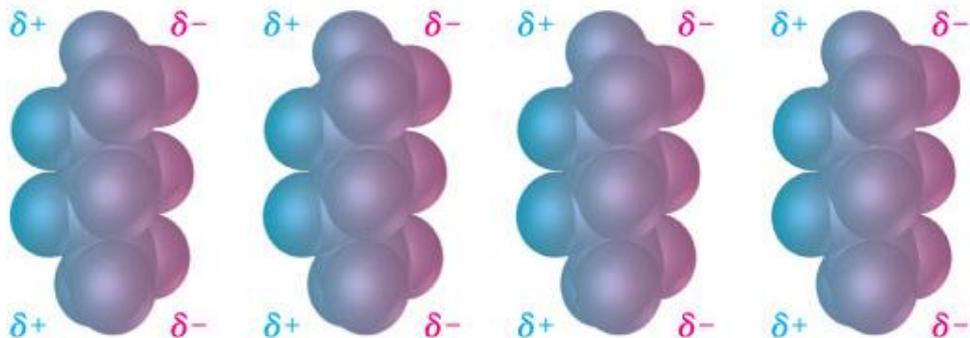
- Molecole apolari e poco reattive
- Apolari e quindi insolubili in acqua
- Apolari e quindi caratterizzate da deboli interazioni intermolecolari

# 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.

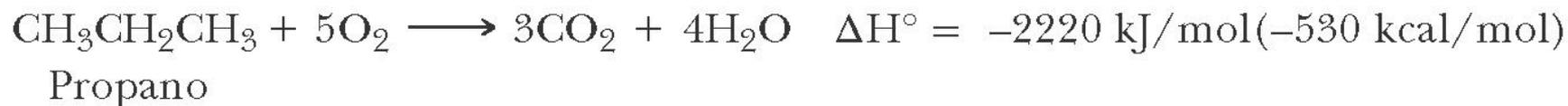


# Reattività degli alcani

- 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 CO<sub>2</sub>

# Reazione di combustione

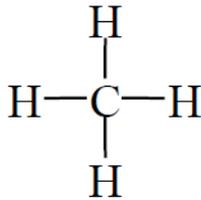
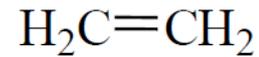
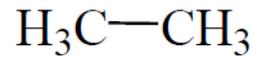
quando si bilanciano le equazioni per le reazioni di combustione degli idrocarburi, per prima cosa si bilancia il numero di atomi di carbonio, poi il numero di atomi di idrogeno, quindi si bilanciano gli atomi di ossigeno. Se l'equazione è ancora non bilanciata, valutare il raddoppio di tutti i coefficienti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



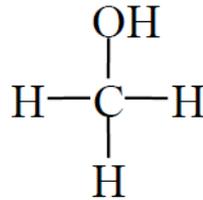
# Stati di ossidazione del carbonio

- 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.

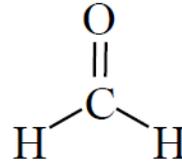
# Ossidazione e riduzione



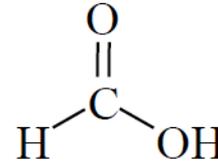
metano



metanolo



formaldeide



acido formico



anidride  
carbonica

ossidazione

→  
più legami C-O, meno legami C-H

riduzione

←  
meno legami C-O, più legami C-H

# **Fonti di carbonio per la chimica organica**



# Carbon

for organic chemistry & plastics

## Renewable Carbon

Biomass  
(re)grown

CO<sub>2</sub>  
(re)captured

Recycling  
(re)cycled

## Fossil Carbon

Crude Oil  
finite

Natural Gas  
finite

Coal  
finite

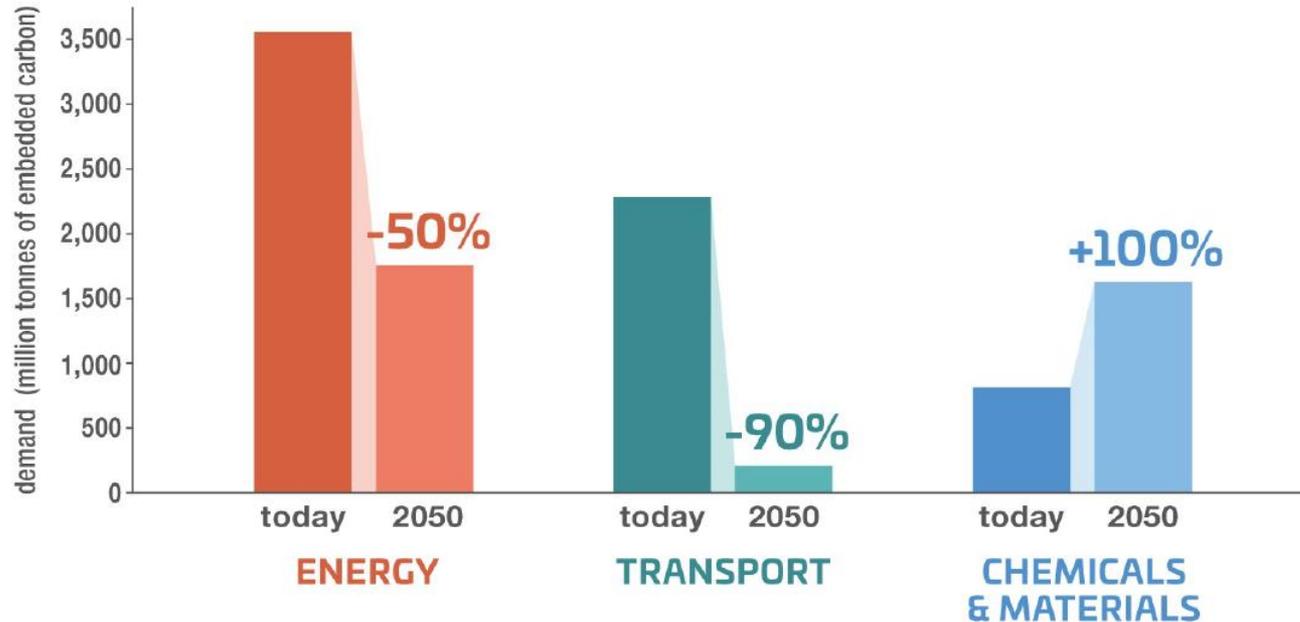
# Materie prime fossili

- 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

# Chi consuma le materie prime fossili?

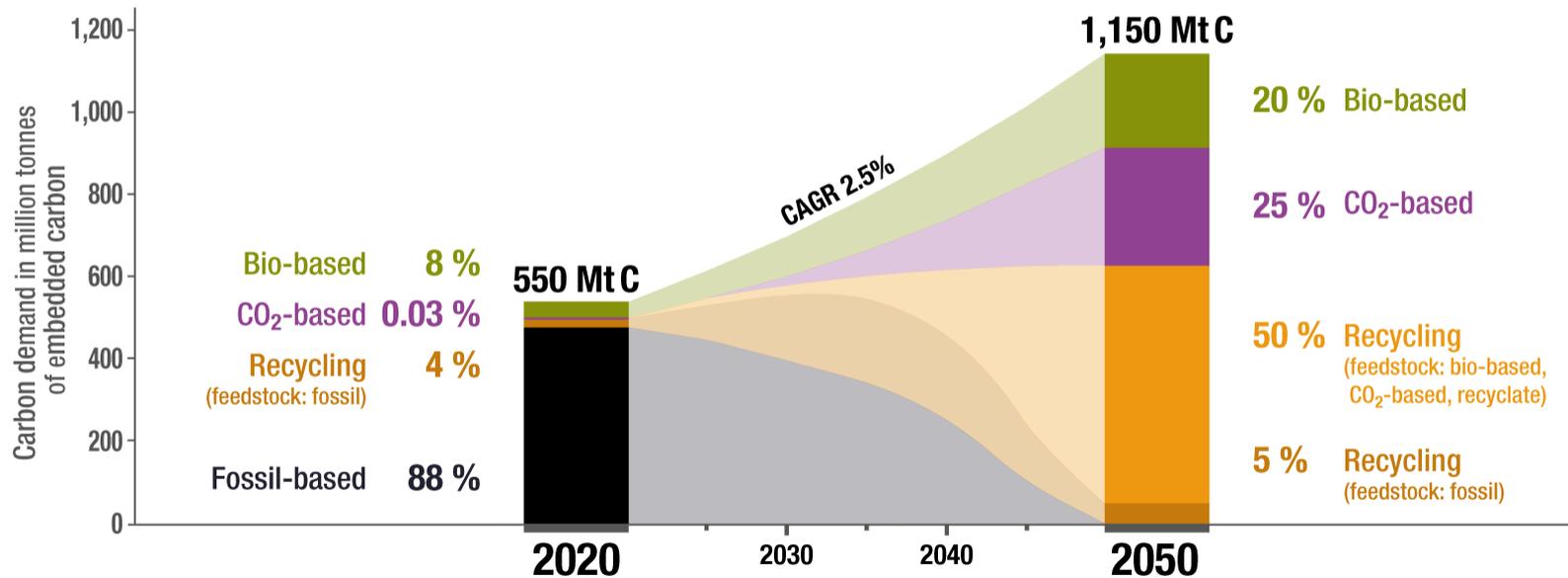
## Embedded Carbon Demand for Main Sector

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



# Carbon Embedded in Chemicals and Derived Materials

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



# 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.

**Circa il 7-10% del petrolio estratto globalmente viene usato dal settore chimico e dei materiali (plastiche)**



**1 barile=159 L**

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

N. ↕	Paese ↕	Produzione di petrolio (barili/giorno) ↕	Produzione di petrolio per abitante (barili/giorno/ milione di persone) ↕
-	Produzione mondiale	80.622.000	10.798
1	 Stati Uniti <sup>[2]</sup>	15.043.000	35.922
2	 Russia	11.200.000	73.292
3	 Arabia Saudita (OPEC)	10.460.710	324.866
4	 Iraq (OPEC)	4,451,516	119.664
5	 Iran (OPEC)	3,990,956	49.714
6	 Cina	3,980,650	2.836
7	 Brasile	3,762,694	37.931
8	 Emirati Arabi Uniti (OPEC)	3,106,077	335.103
9	 Kuwait (OPEC)	2,923,825	721.575
10	 Canada	2,515,459	100.113
11	 Venezuela (OPEC)	2,276,967	69.914

# 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



<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)

# Lavorazione del petrolio



- **Approvvigionamento** di greggio.
- **Conversioni:** processi che convertono il greggio in prodotti desiderati (separazione, conversione, rifinitura, etc.) in modo economico e ambientalmente accettabile.

# Petrolio e trasformazione degli alcani nell'industria petrolchimica

- La maggioranza dei suoi componenti sono:

- **Idrocarburi**, quali alcani (chiamati paraffine), cicloalcani (chiamati nafteni), alcheni, aromatici (~10%), poliaromatici (PAH).

C 84-87%

H 11-14

S 0-6

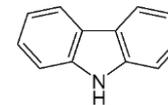
N 0-1

O 0-2

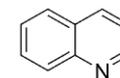


tiofene

- **Composti contenenti eteroatomi** come zolfo (tiofene e derivati), ossigeno (acidi e fenoli), azoto (carbazolo, chinolina).



carbazolo

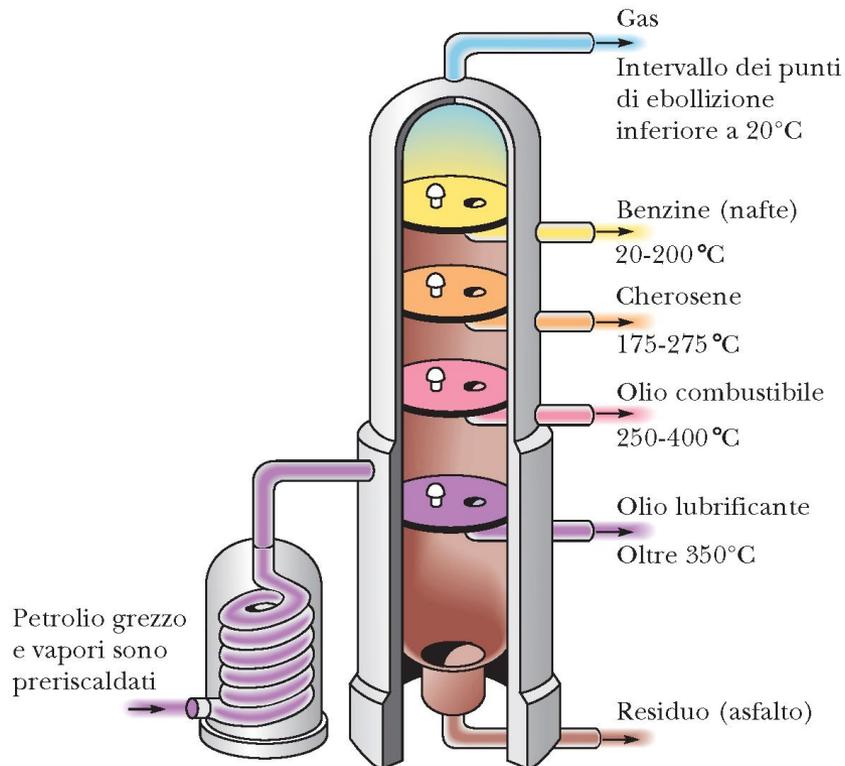


chinolina

- **Composti metallici**, presenti in tracce
  - V, Ni, Fe, Al, Na, Ca, Cu, e U.

# 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.



**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.

# Dai prodotti della raffineria alla chimica

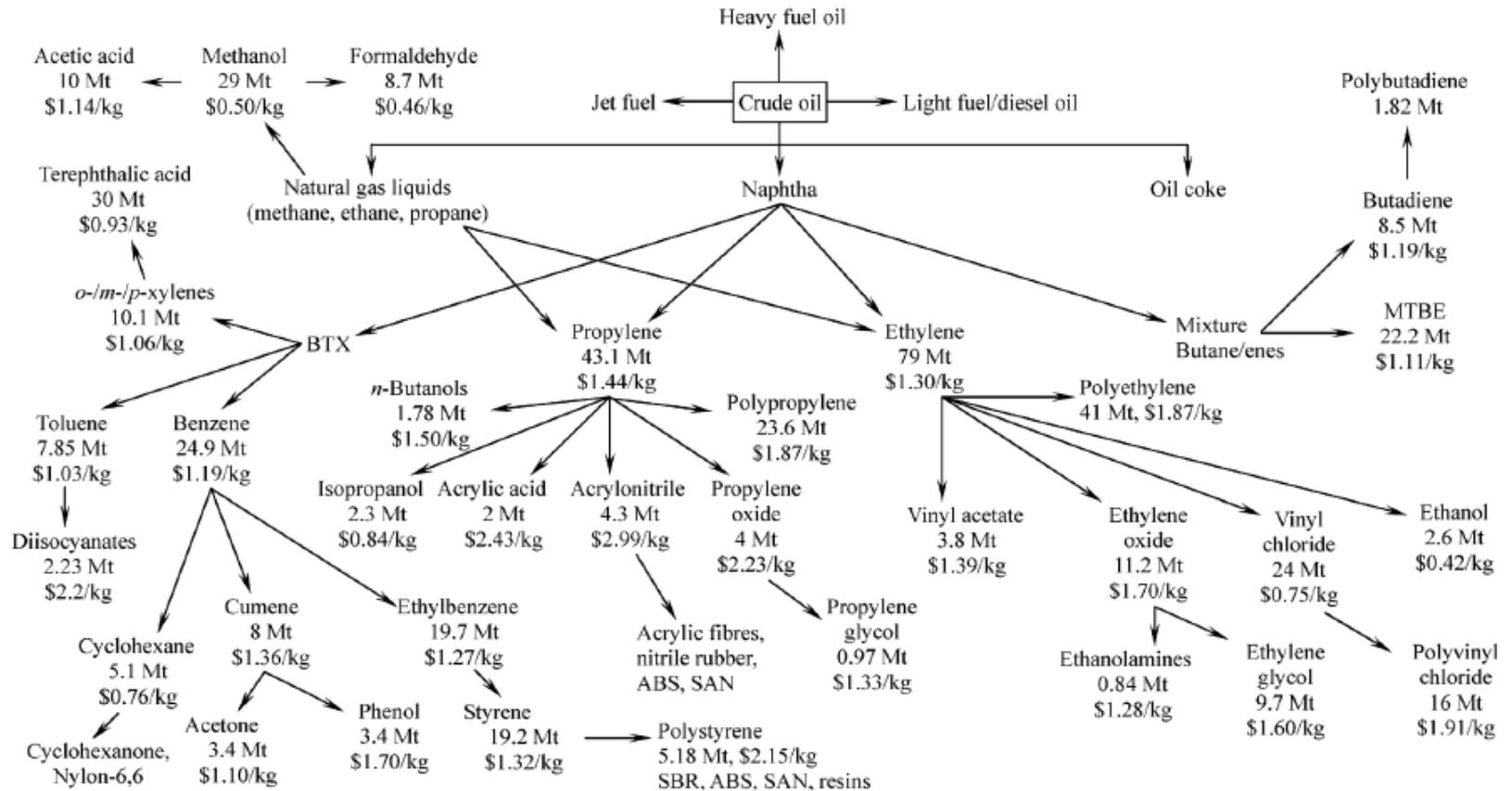
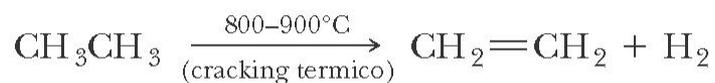


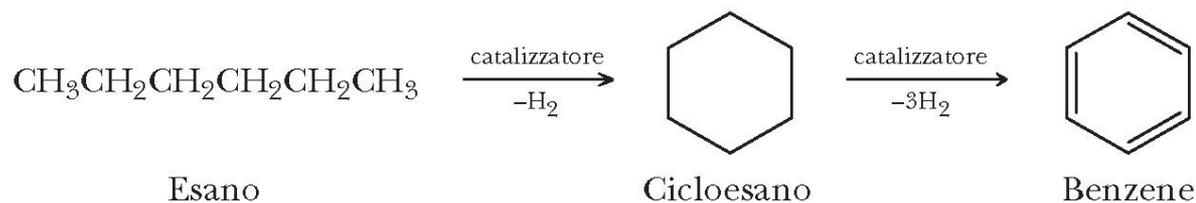
Fig. 1 Base chemicals and derivatives produced from petroleum (production capacities were taken from the journal *Chemical Engineering News*<sup>4</sup> and unit prices were taken from the *ICIS Indicative chemical prices*<sup>5</sup>).

# Cracking e reforming catalitico



Etano

Etilene



Esano

Cicloesano

Benzene

# ENI investe 2 miliardi in Versalis, chiude il cracking

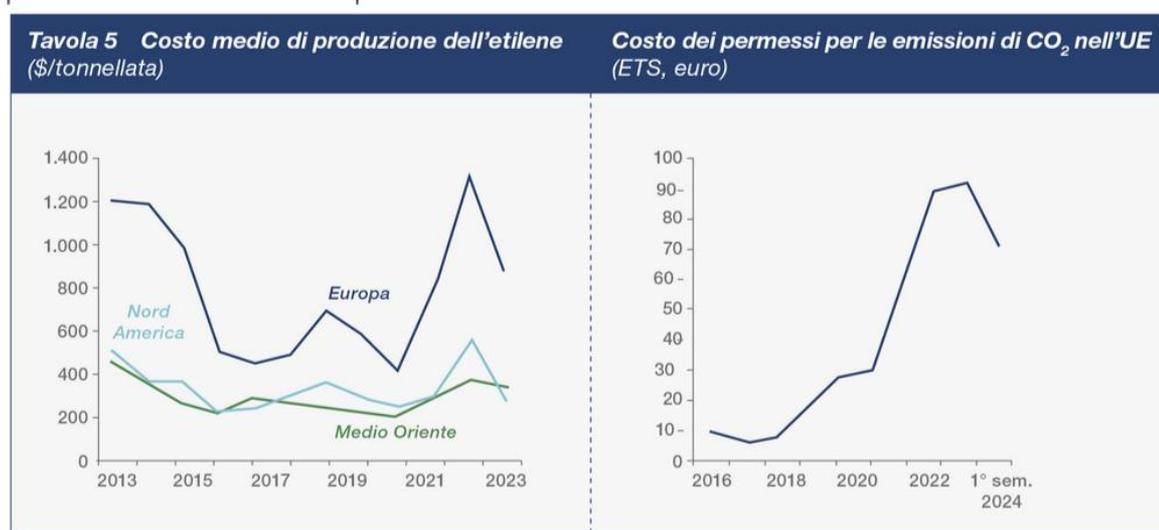
Annunciato il fermo degli impianti di cracking a Brindisi e Priolo, e della produzione di polietilene a Ragusa. In arrivo una nuova organizzazione societaria.

24 ottobre 2024 14:45

ENI ha anticipato oggi il piano di trasformazione, decarbonizzazione e rilancio di **Versalis**, la società chimica del gruppo, riservandosi di fornire ulteriori dettagli il 25 ottobre durante la presentazione dei dati finanziari relativi al terzo trimestre.

Il **piano di trasformazione**, che si concluderà nel **2029**, prevede **investimenti** per circa **2 miliardi** di euro nei prossimi 5 anni, ma anche la **chiusura** degli impianti di **cracking** a **Brindisi** e a **Priolo** -gli ultimi due rimasti -, e del **polietilene** a **Ragusa**.

Al loro posto saranno realizzati - spiega l'azienda del gruppo ENI - "impianti industriali coerenti con la **transizione energetica** e la **decarbonizzazione** dei vari settori, anche della bioraffinazione e dell'accumulo di energia".



Fonte: Cefic, Ember



BrindisiReport

<https://www.brindisireport.it> > economia > esito-tavoli-r...

### Eni Versalis, la Regione Puglia: "No alla chiusura senza ...

5 giorni fa — L'assessora Serena Triggiani cerca un accordo quadro per procrastinare la cessazione dell'impianto di cracking: "Una svolta green per ...



RavennaToday

<https://www.ravennatoday.it> > cronaca > eni-versalis-pia...

### Eni-Versalis, chiusure in Puglia e Sicilia fanno tremare ...

23 gen 2025 — Piano di dismissione Eni-Versalis, Cgil: "A rischio posti di lavoro anche a Ravenna". Il sindacato chiede al Governo di non avallare il piano ...



Collettiva

<https://www.collettiva.it> > Copertine > Lavoro

### Versalis, Cgil: no alla dismissione della chimica di base

4 giorni fa — Eni, ricorda una nota della Cgil Sicilia, ha deciso di chiudere dal primo gennaio la produzione a Versalis a Ragusa e dal 31 dicembre 2025 ...

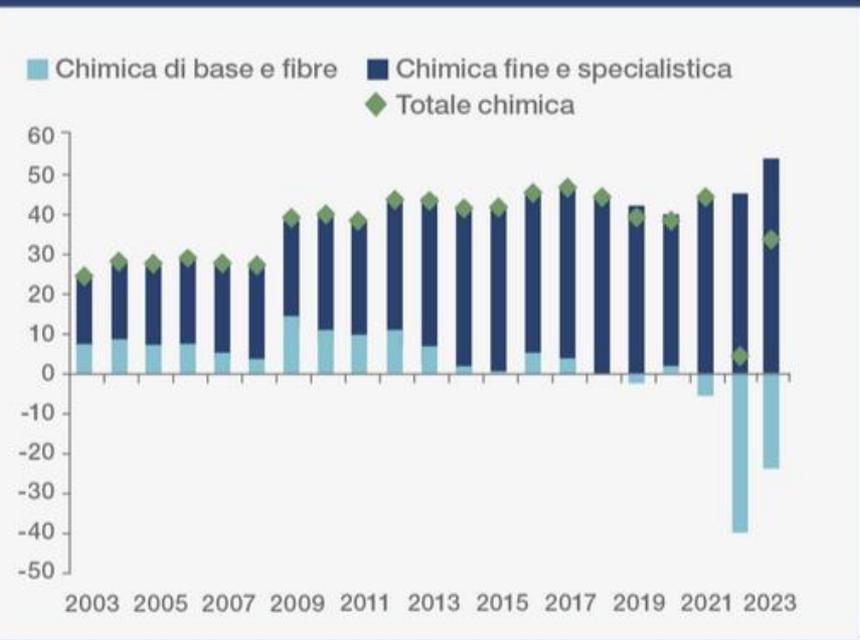


il manifesto

<https://ilmanifesto.it> > eni-dismette-versalis-cgil-a-rischi...

### Eni dismette Versalis. Cgil: «A rischio 20 mila posti di lavoro

**Tavola 3 Saldo commerciale della chimica europea (UE27, miliardi di euro)**



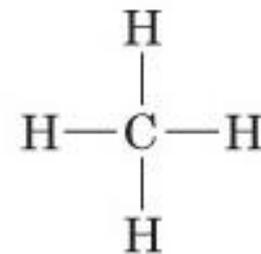
Fonte: elaborazioni su Eurostat

# Gas naturale

è un combustibile fossile, come il petrolio e il carbone. È costituito da una miscela di idrocarburi, in massima parte **metano**, e da altre sostanze gassose come **anidride carbonica**, **azoto**, **idrogeno solforato** e, in qualche caso, **elio**, **radon** e **cripton**. Le miscele che contengono soprattutto **metano** si dicono secche, mentre quando sono presenti anche idrocarburi come il **propano** e il **butano** sono umide. Prima di essere avviato all'utilizzo il gas naturale viene trattato in modo da eliminare l'anidride carbonica e l'azoto, che lo rendono poco infiammabile, e l'idrogeno solforato che è un gas tossico e corrosivo. Ciò che resta è prevalentemente metano.

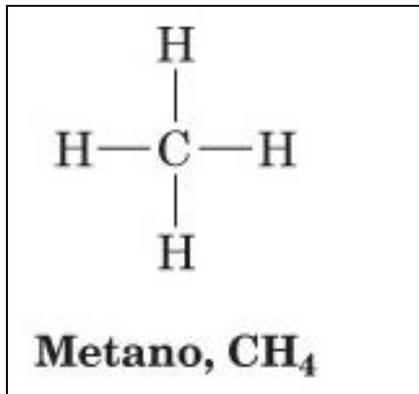
Oltre che in forma di gas, esso può essere importato via nave come GNL, ossia Gas Naturale Liquefatto. Una serie di processi chimici permetterà successivamente di riportare il gas nella sua forma naturale per poter poi essere utilizzato nelle reti nazionali per il trasporto e la distribuzione.

Il metano diventa liquido a una temperatura critica di -83 gradi centigradi quando è sottoposto a una pressione di 45 atmosfere. Il passaggio allo stato liquido può avvenire diminuendo la temperatura o aumentando la pressione. Ad esempio, a -161 gradi centigradi il metano diventa liquido anche a pressione ambiente.

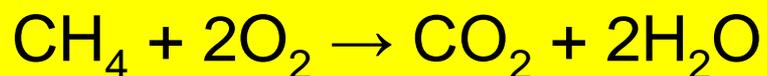


Metano, CH<sub>4</sub>

Il **metano** è l'**idrocarburo gassoso più semplice** e quello con la molecola più piccola, formata da un atomo di carbonio e quattro di idrogeno. È più leggero dell'aria (alla temperatura di 15 gradi centigradi e alla pressione di 1013,25 millibar, ha un peso specifico di 0,678 chilogrammi al metro cubo), non ha colore né odore e non è tossico.



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



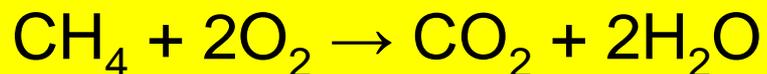
**Carburante per autotrazione.**

Miscelato con l'aria, il metano è infiammabile solo se la sua concentrazione è compresa tra il 5% e il 15%.

Sotto al 5%, la quantità di gas naturale non è sufficiente ad alimentare la combustione, mentre, sopra al 15% non c'è abbastanza ossigeno.

Alla temperatura di 15 gradi centigradi e alla pressione atmosferica, 1 metro cubo di metano sviluppa oltre 8.000 chilocalorie.

A queste condizioni, 1 metro cubo di metano ha perciò un contenuto energetico pari a quello di 1,2 chilogrammi di carbone e di 0,83 chilogrammi di petrolio.

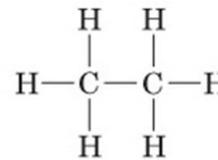


I gas come il **propano** e il **butano**, rispettivamente con 3 e 4 atomi di carbonio, hanno una temperatura critica superiore alla temperatura ambiente e, quindi, diventano liquidi per effetto di un semplice aumento di pressione.

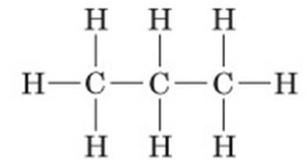
## GPL: Gas di petrolio liquefatti

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

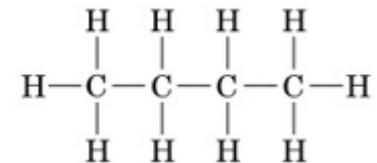
vengono liquefatti mediante compressione a pressioni relativamente modeste, comprese tra 2 e 8 bar, per ridurre l'ingombro e rendere più economico il trasporto



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

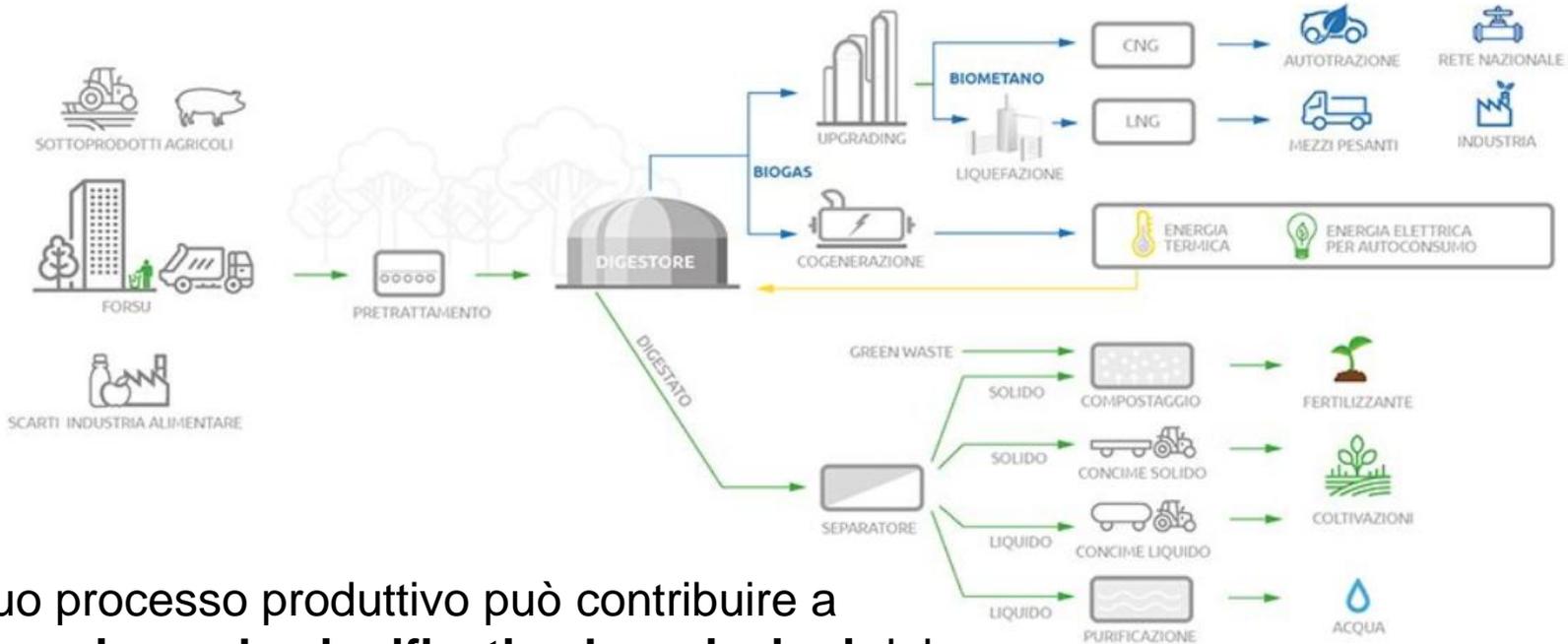


Propano, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>



Butano

Il **biometano** è una **fonte di energia rinnovabile** che si ottiene da biomasse agricole, agroindustriali e dalla frazione organica dei rifiuti solido urbani (FORSU). Si ottiene in due fasi principali: la prima è la produzione del biogas grezzo, prevalentemente attraverso la digestione anaerobica di biomasse, e la seconda è la rimozione delle componenti non compatibili con l'immissione in rete (CO<sub>2</sub>).



Il suo processo produttivo può contribuire a **ridurre in modo significativo le emissioni** del settore agricolo.

Il digestato (ciò che rimane dopo il processo di digestione anaerobica delle matrici agricole) è un ottimo fertilizzante naturale.

## The Italian model

- 1) **Research and innovation:** compostable plastics
- 2) **Legislation:** banning of non-compostable plastic bags
- 3) **Public-Private investments:** revamping of waste-treatment plants, R&I



**2019:**  
**4.6 M tons of organic waste**



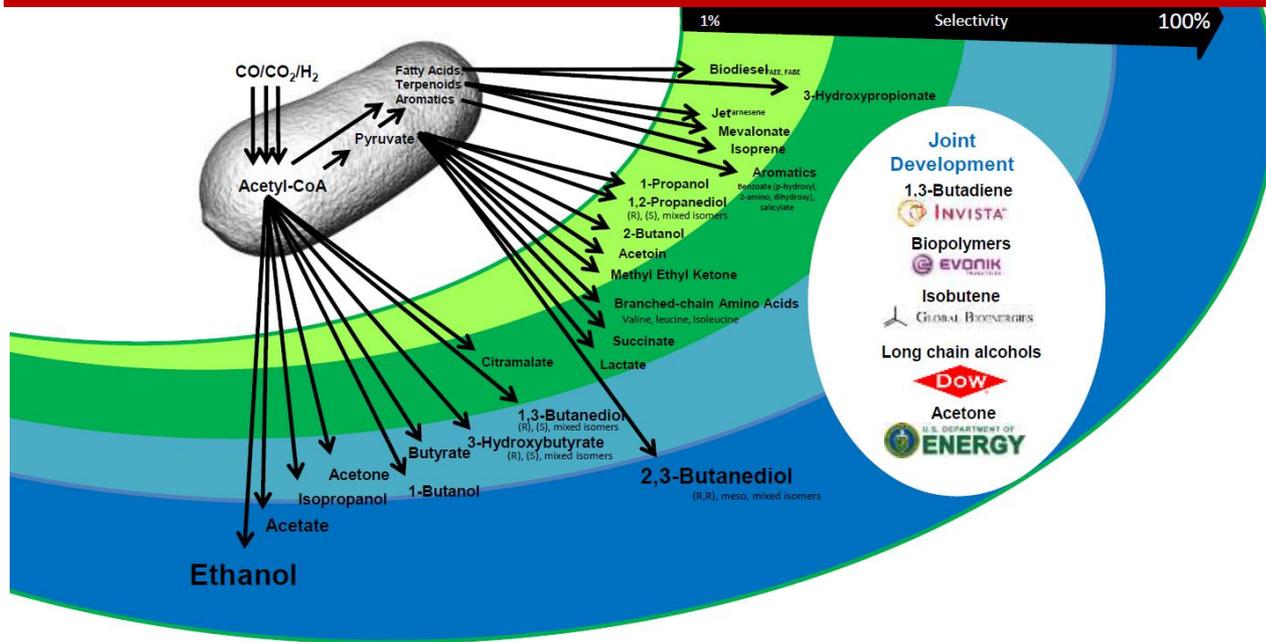
**2 M tons of compost:**  
*375.000 tons of organic carbon back to the soil*



**BIOMETHANE**

*PRODUCED: 100 M m<sup>3</sup>*  
*SAVED: 4.3 M tons of CO<sub>2</sub> emissions*

# Biotechnologies for CO and CO<sub>2</sub> transformation into chemicals and fuels: metabolic engineering of acetogenic bacteria



# Chemicals and monomers obtained from fermentation

The cell:  
The most complex and efficient  
chemical laboratory  
at low environmental impact

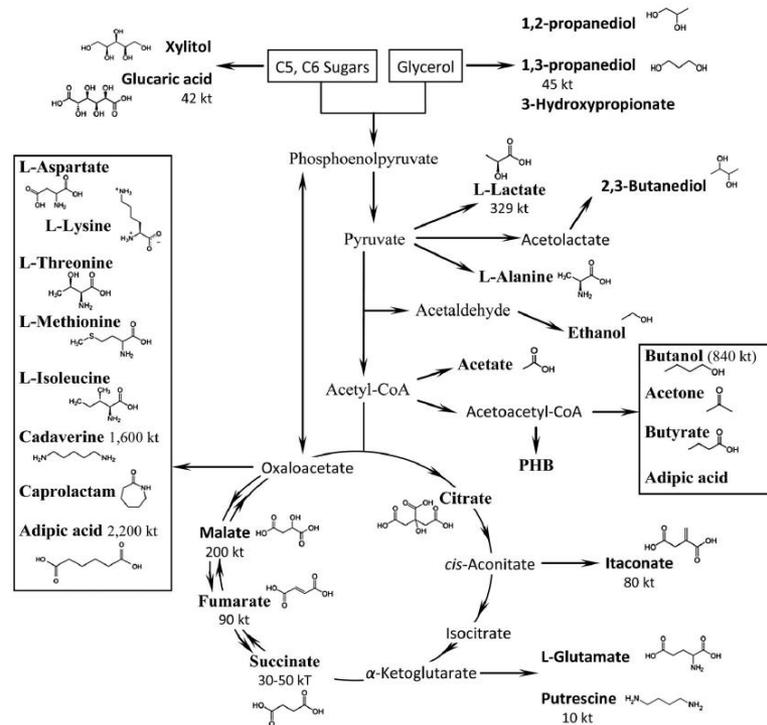
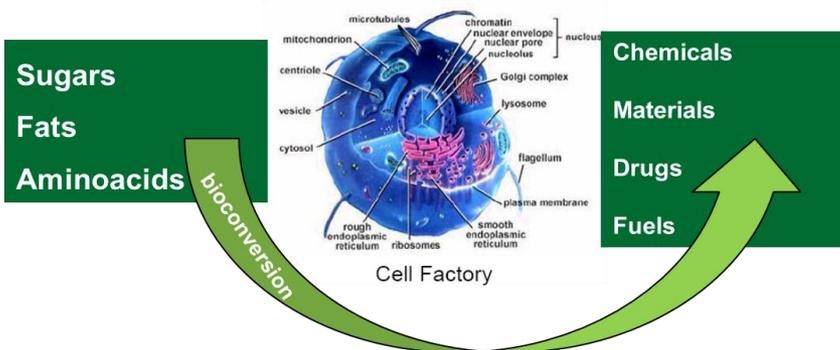
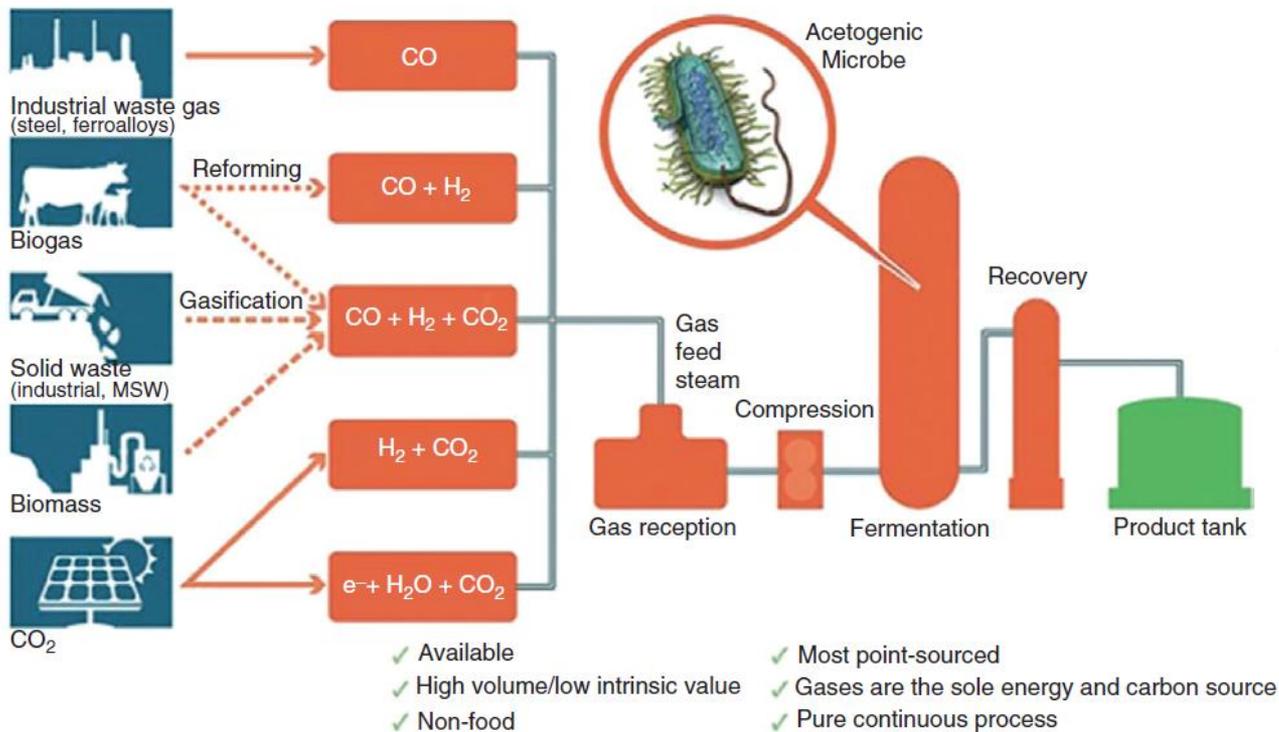


Fig. 2 Building blocks that could be produced via fermentation. Numbers next to biochemicals designate the total annual production in thousands of t.



### Life Cycle Assessments of Ethanol Production via Gas Fermentation: Anticipated Greenhouse Gas Emissions for Cellulosic and Waste Gas Feedstocks

Robert M. Handler,<sup>1\*</sup> David R. Shonnard,<sup>†</sup> Evan M. Griffing,<sup>‡</sup> Andrea Lai,<sup>§</sup> and Ignasi Palou-Rivera<sup>§</sup>

<sup>1</sup>Sustainable Futures Institute, Department of Chemical Engineering, Michigan Technological University, Houghton, Michigan 49931, United States

<sup>†</sup>Environmental Clarity, 2505 Fauquier Lane, Reston, Virginia 20191, United States

<sup>‡</sup>LanzaTech, 8045 Lamson Avenue Suite 400, Skokie, Illinois 60077, United States

**ABSTRACT:** LanzaTech has developed novel microbial bioreactor systems capable of direct gas fermentation to produce ethanol from carbon-containing gases. In this study, a life-cycle assessment method is used to quantify the global warming potential of several scenarios for producing renewable ethanol with the LanzaTech process. Scenarios considering ethanol produced from steel mill waste gases or biomass (corn stover, forest residues, or switchgrass, via gasification) have been considered, using input data from peer-reviewed literature, government reports, life cycle inventory databases, and LanzaTech process engineering estimates. Using standardized life-cycle assessment methods, ethanol produced via LanzaTech fermentation appears to result in greenhouse gas emissions that are at least 66% lower than that of conventional fossil gasoline, with biomass-based ethanol achieving close to 90% emission reductions. Results indicate that the LanzaTech gas fermentation technology can be a viable alternative for producing next-generation biofuels that satisfy United States Renewable Fuels Standard policies concerning fuels with a reduced greenhouse gas emissions footprint.

Article in Industrial & Engineering Chemistry Research · December 2015

DOI: 10.1021/acs.iecr.5b03215

<https://www.youtube.com/watch?v=oZXAb4fUlq8>

<https://www.youtube.com/watch?v=k3WLwKrEu7c>

<https://www.youtube.com/watch?v=7aw2eoJLyug>

<https://www.youtube.com/watch?v=A3Uq6otg7fQ>

<https://www.youtube.com/watch?v=RIT3UyoDE9Q>

## Fermentation of waste gases

Business & Financial News | May 11, 2021

Joint News Release

LanzaTech, 2012



ArcelorMittal, 2017

“ArcelorMittal, LanzaTech and Primetals Technologies announce partnership to construct breakthrough €87m biofuel production facility”

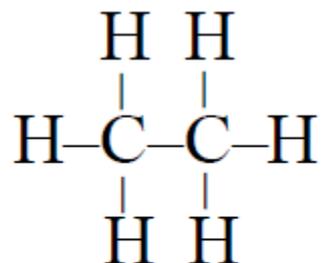


### LanzaTech and BASF achieve first milestone in utilizing industrial off-gases for chemical production

With appropriate enzymes or bacteria, CO and CO<sub>2</sub> can be converted into chemicals through bioreactions. One advantage of bioconversion is that it normally takes place at low temperature and pressure, so energy consumption is low. The process is, in general, simple, with mainly bioreactor(s) and a product-separation/purification process leading to low costs. The processes can take the exhaust from emission sources without the need to treat and purify the flue gas.

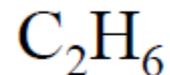
# Rappresentazione e scrittura degli alcani

## Formula strutturale



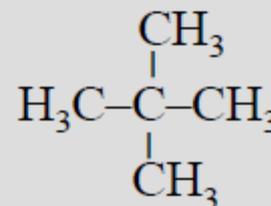
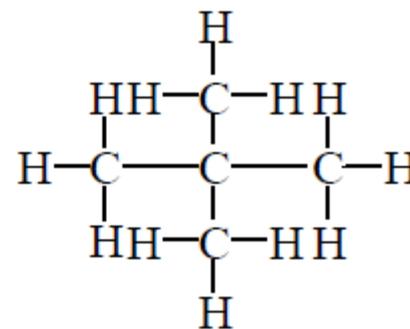
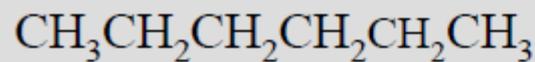
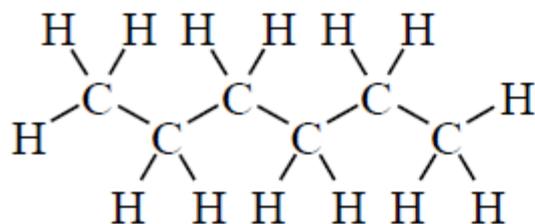
Etano

## Formula molecolare

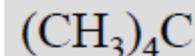


# Scrittura condensata

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



Alcuni legami vengono mantenuti



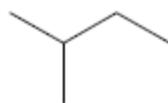
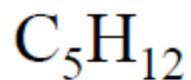
# Isomeria costituzionale o strutturale

- 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.

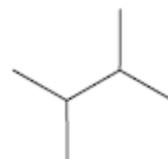
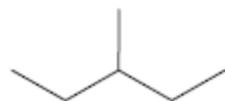
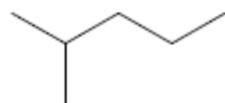
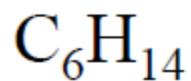
# Esempi



2 isomeri



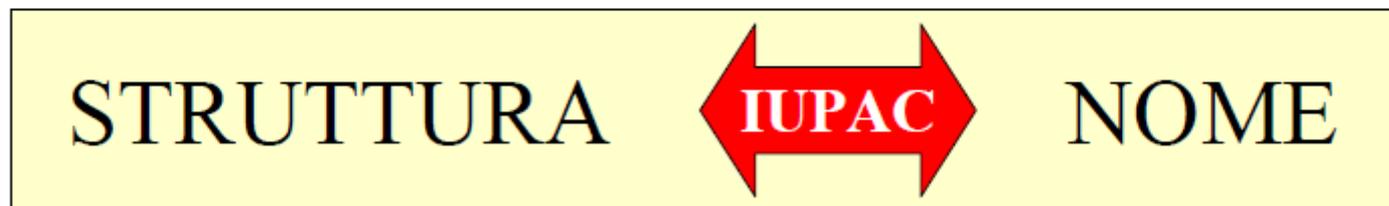
3 isomeri



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.



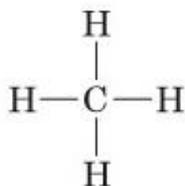
prefisso + infisso + suffisso

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

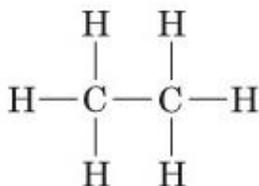
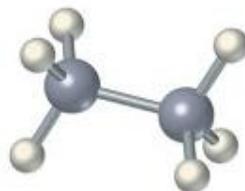
b) No presenza di doppi o tripli legami (an-,)

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

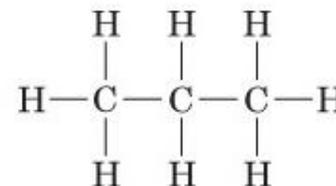
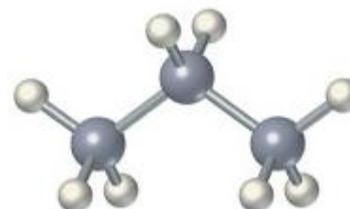
## Costruzione del nome



Met-an-o



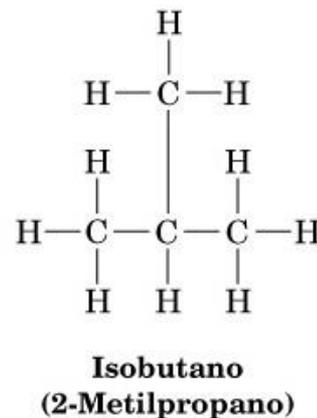
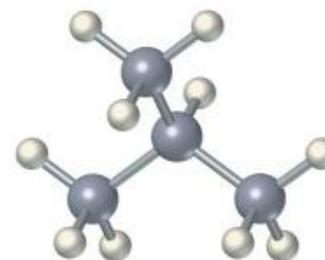
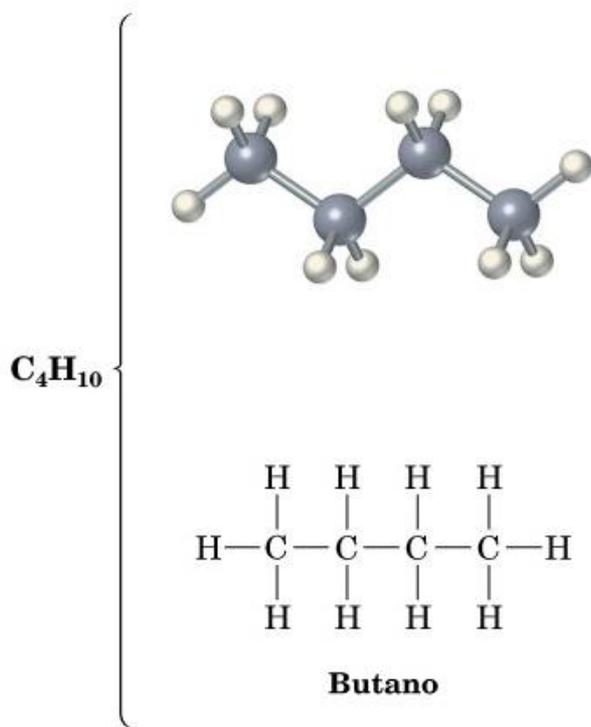
Et-an-o



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**



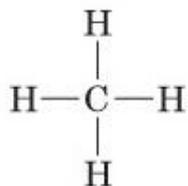
**Alcano lineare**

**Alcano ramificato**

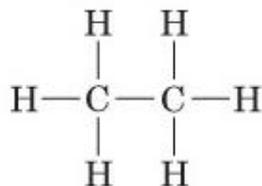
# Alcani ramificati

R = Sostituente alchilico

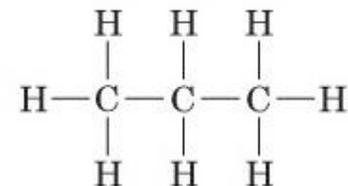
alcano



Metano, CH<sub>4</sub>

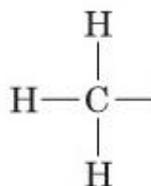


Etano, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>

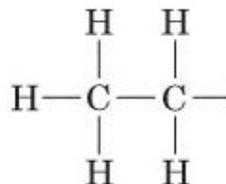


Propano, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>

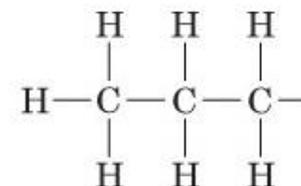
Sostituente  
alchilico



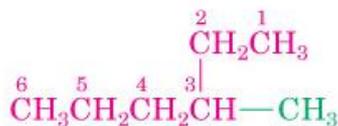
Metile



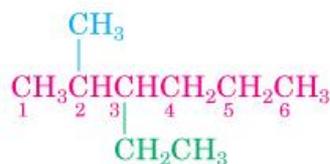
Etile



Propile

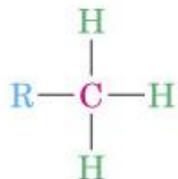


3-Metilesano

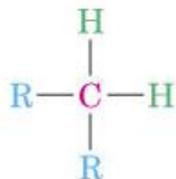


3-Etil-2-metilesano

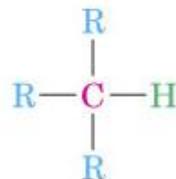
# Classificazione dei carboni ed idrogeni



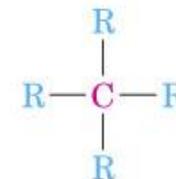
Il carbonio *primario* (1°) è legato ad un altro atomo di carbonio



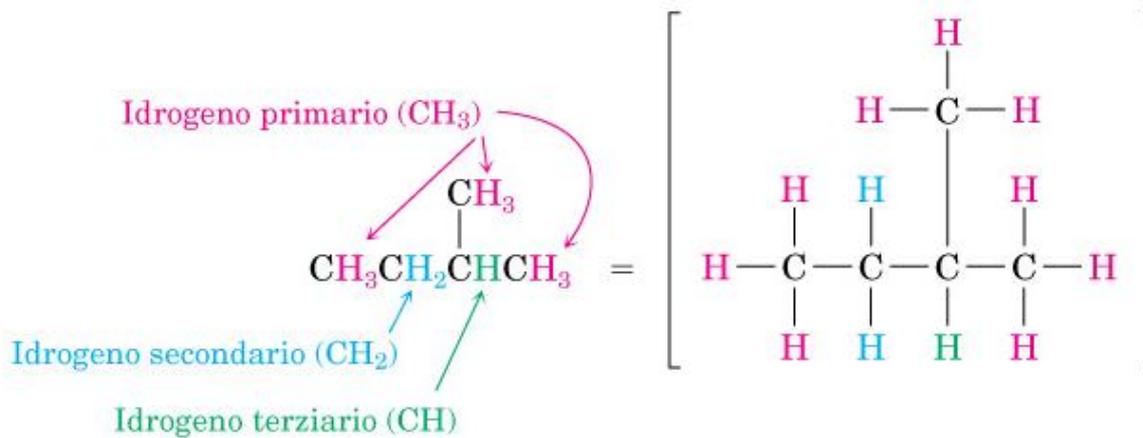
Il carbonio *secondario* (2°) è legato ad altri due atomi di carbonio



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

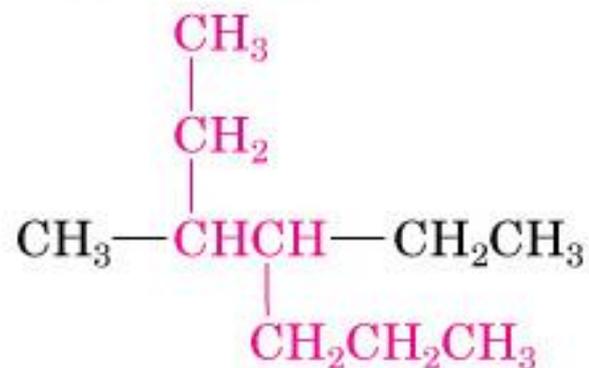
### Identificazione catena principale negli alcani

a) deve contenere il numero massimo di carboni

b) deve contenere il numero massimo di sostituenti

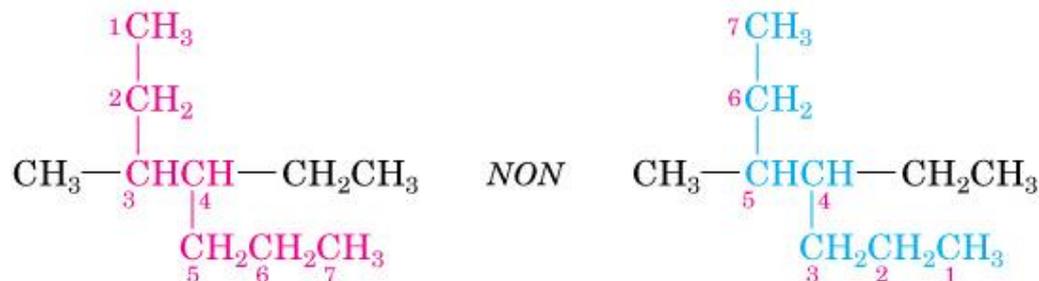


Denominato come un **esano** sostituito



Denominato come un **eptano** sostituito

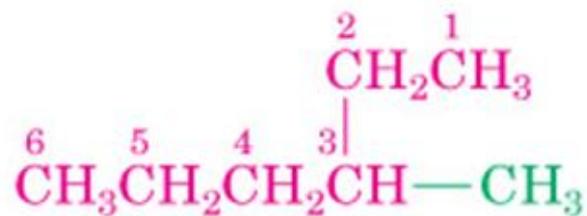
4-etil-3-metileptano



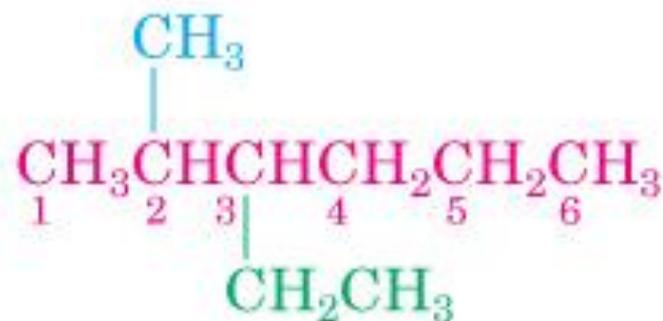
3-etil-4,7-dimetilnonano

## Numerazione catena principale negli alcani

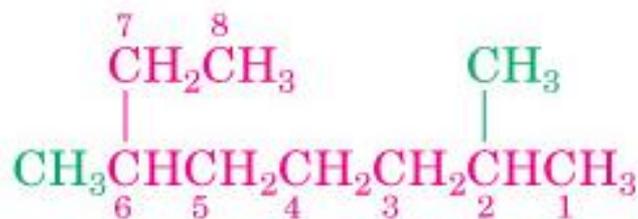
- si attribuisce il numero più basso al sostituito incontrato per primo
- se non è discriminante si opera la scelta in funzione dell'ordine alfabetico



**3-Metilesano**



**3-Etil-2-metilesano**



**2,6-Dimetilottano**

# Nomenclatura cicloalcani



MA

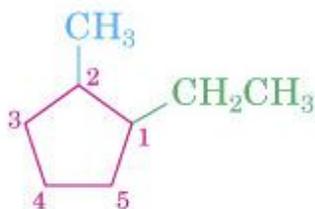


3 atomi di  
carbonio

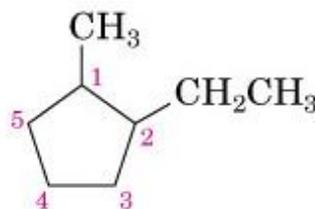
4 atomi di  
carbonio

**Metilciclopentano**

**1-Ciclopropilbutano**



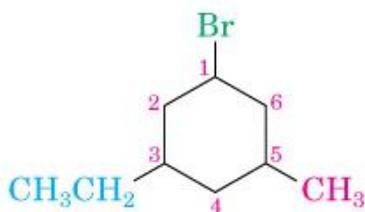
NON



**1-Etil-2-metilciclopentano**

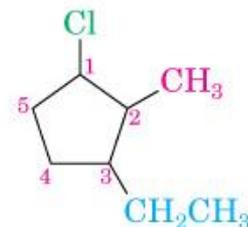
**2-Etil-1-metilciclopentano**

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.

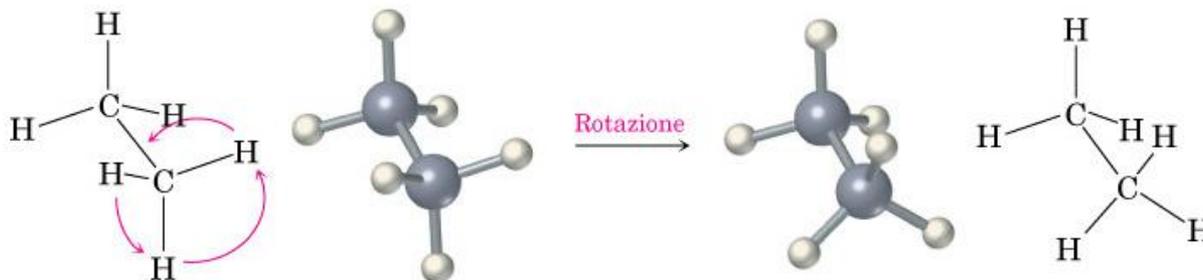


**1-Cloro-3-etil-2-metil-ciclopentano**

# Conformazioni degli alcani e cicloalcani

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

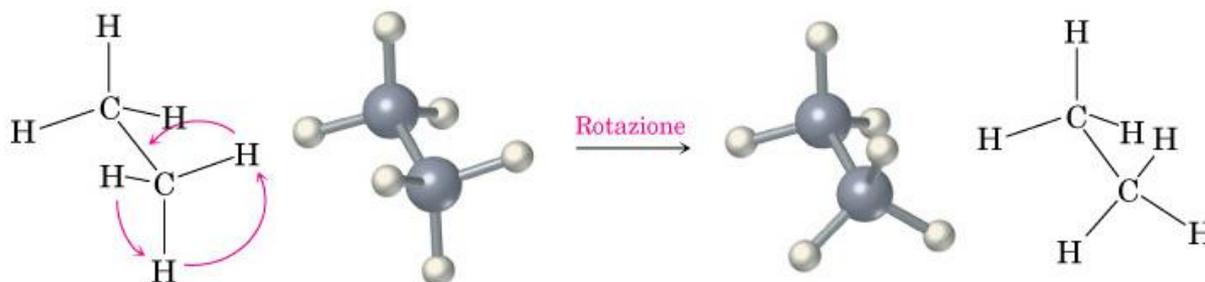
**FIGURA 4.1** Due conformazioni dell'etano. I differenti conformeri si interconvertono per rotazione attorno al legame C—C.



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

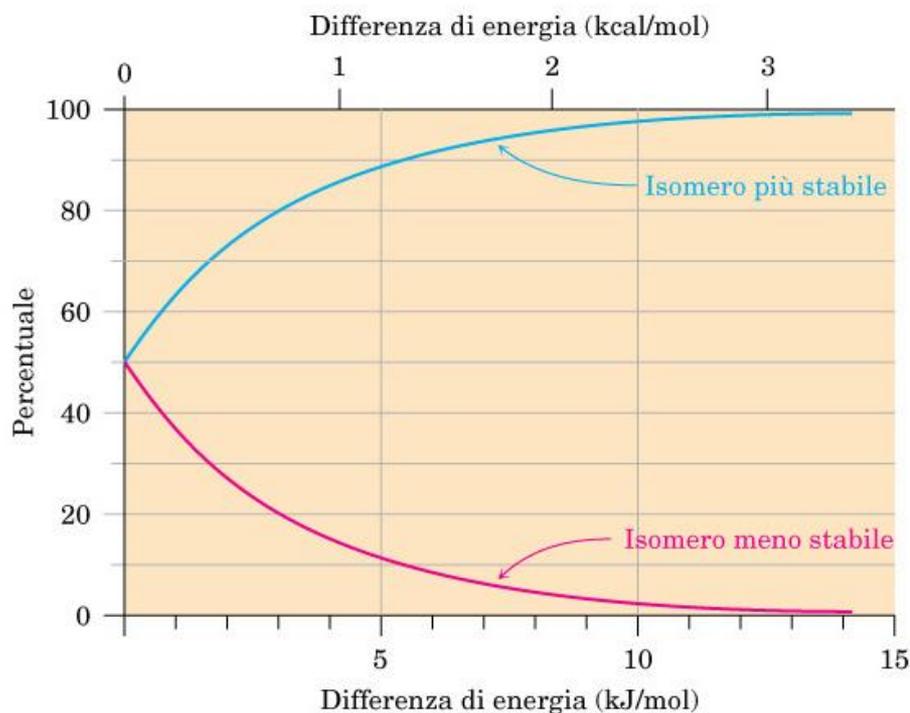
## Le diverse conformazioni sono in equilibrio tra loro

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

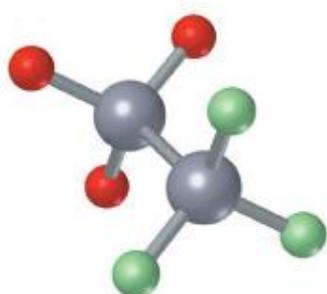


**FIGURA 4.18** Grafico delle percentuali all'equilibrio dei due isomeri in funzione della loro differenza di energia. Le curve sono calcolate usando l'equazione  $\Delta E = -RT \ln K$ .

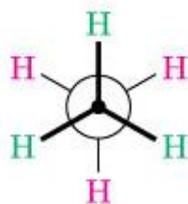
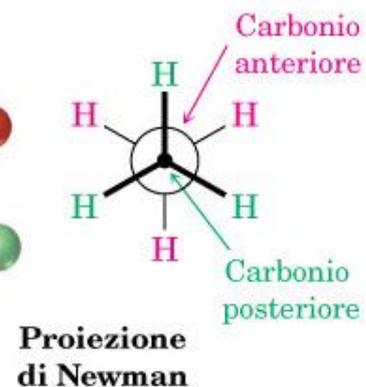
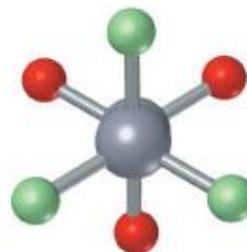
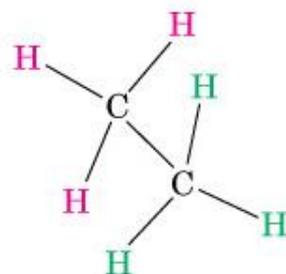
$$K = \frac{[\text{Conf. B}]}{[\text{Conf. A}]}$$



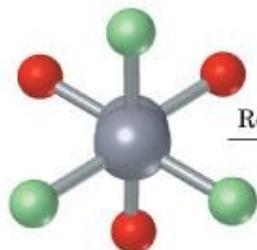
# Le proiezioni di Newman



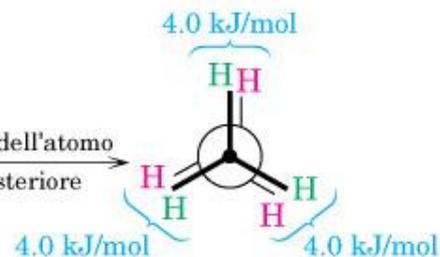
Rappresentazione  
a cavalletto



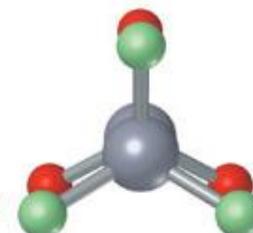
Etano: conformazione  
sfalsata



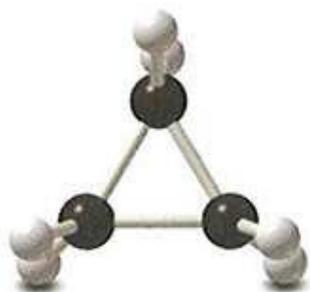
Rotazione di 60° dell'atomo  
di carbonio posteriore



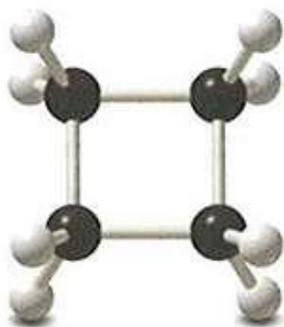
Etano: conformazione  
eclissata



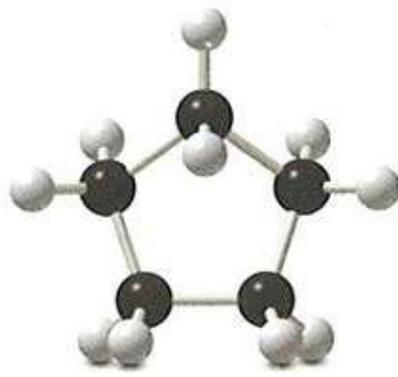
## Cicloalcani semplici



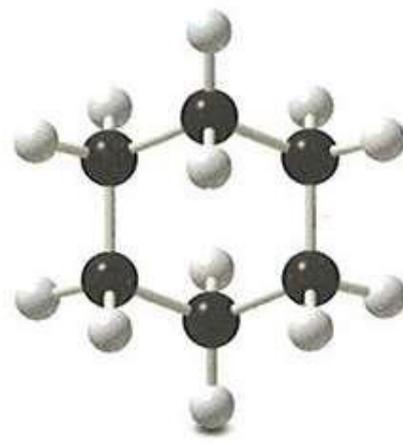
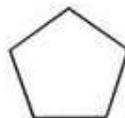
ciclopropano  
 $C_3H_6$



ciclobutano  
 $C_4H_8$



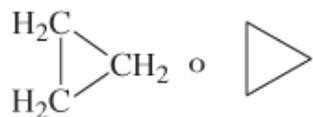
ciclopentano  
 $C_5H_{10}$



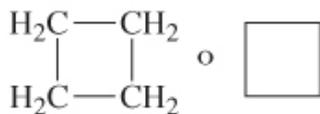
cicloesano  
 $C_6H_{12}$



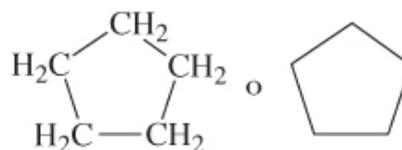
# Cicloalcani



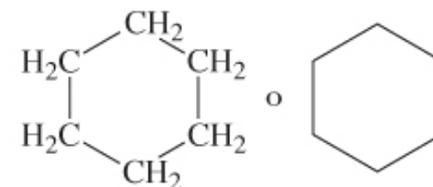
**Ciclopropano**  
 $\text{C}_3\text{H}_6$



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



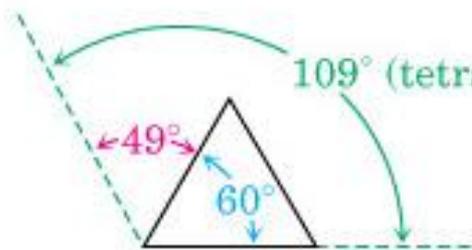
**Ciclopentano**  
 $\text{C}_5\text{H}_{10}$



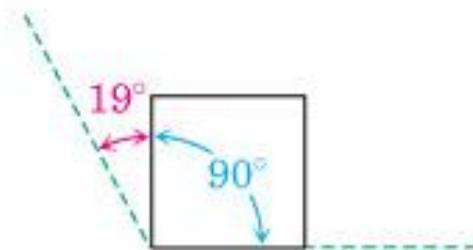
**Cicloesano**  
 $\text{C}_6\text{H}_{12}$

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

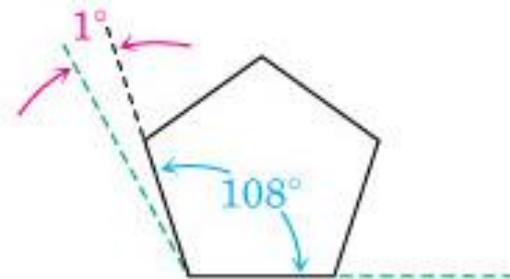
**Tensione angolare e di anello derivante dalla chiusura della catena carboniosa e formazione di un angolo di legame anomalo**



**Ciclopropano**



**Ciclobutano**

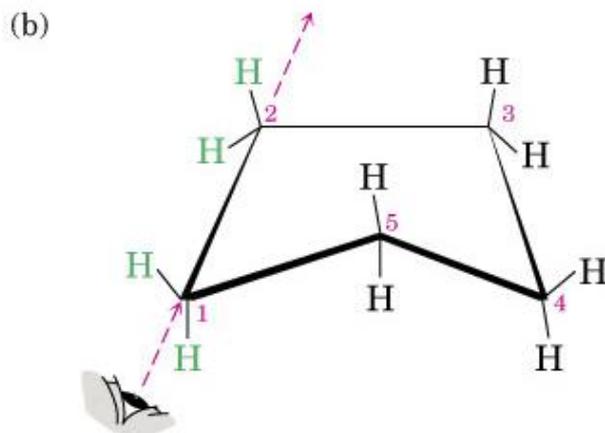
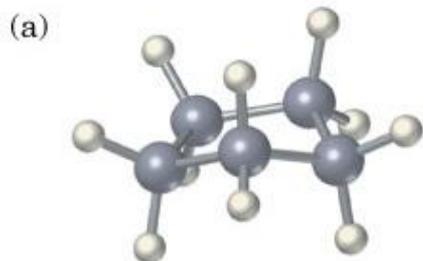


**Ciclopentano**

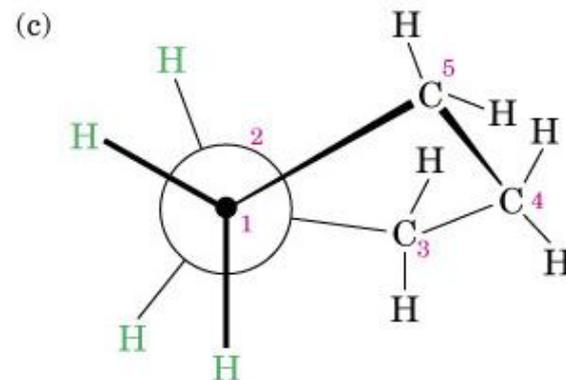
**La chiusura della catena carboniosa determina una restrizione della libertà di ruotare gli atomi attorno ai legami «sigma»**

# 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.



Ossevatore



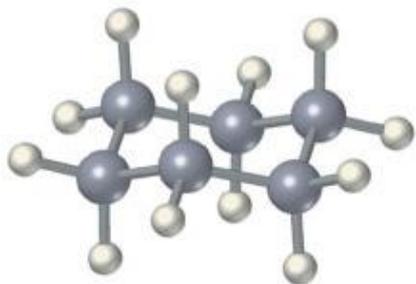
# Cicloesano

La conformazione più stabile è quella a sedia

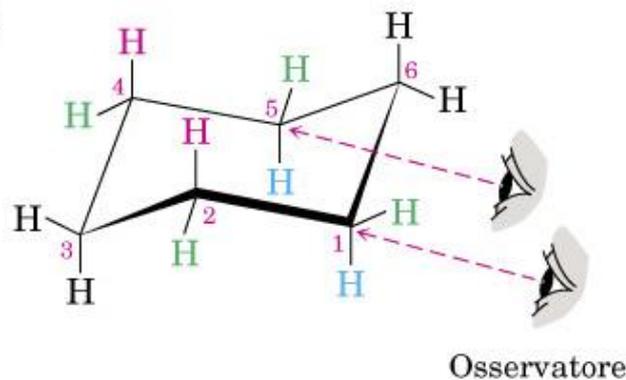
- $111,5^\circ$ : bassa tensione di anello
- Idrogeni sfalsati

**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.

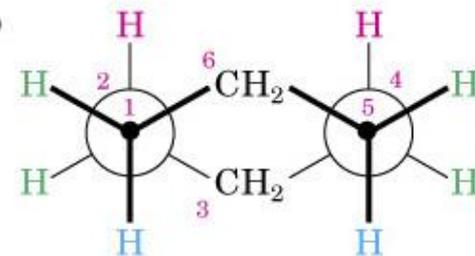
(a)



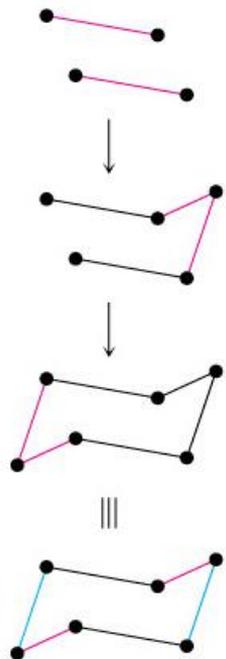
(b)



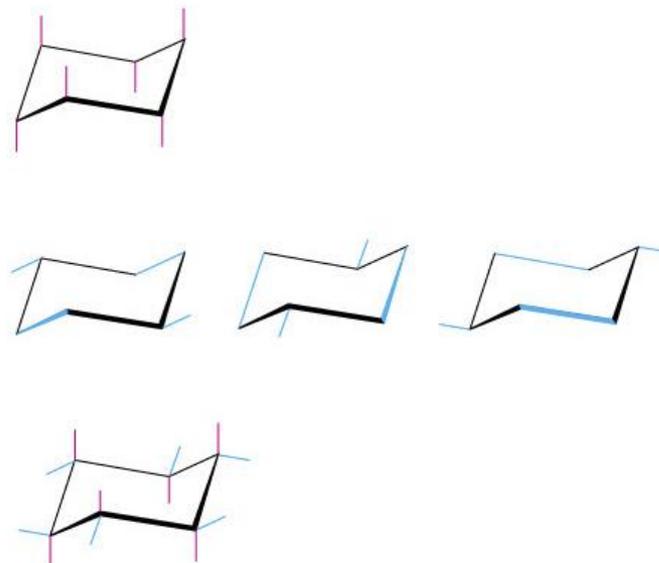
(c)



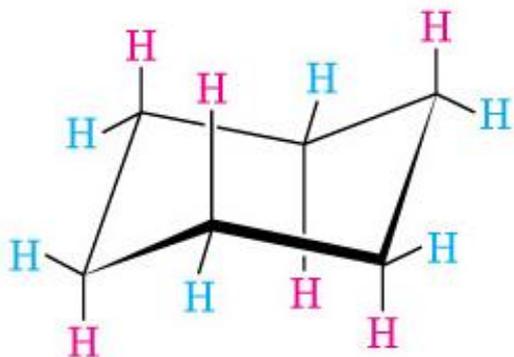
# RAPPRESENTAZIONE DELLA CONFORMAZIONE A SEDIA DEL CICLOESANO



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



Cicloesano completo

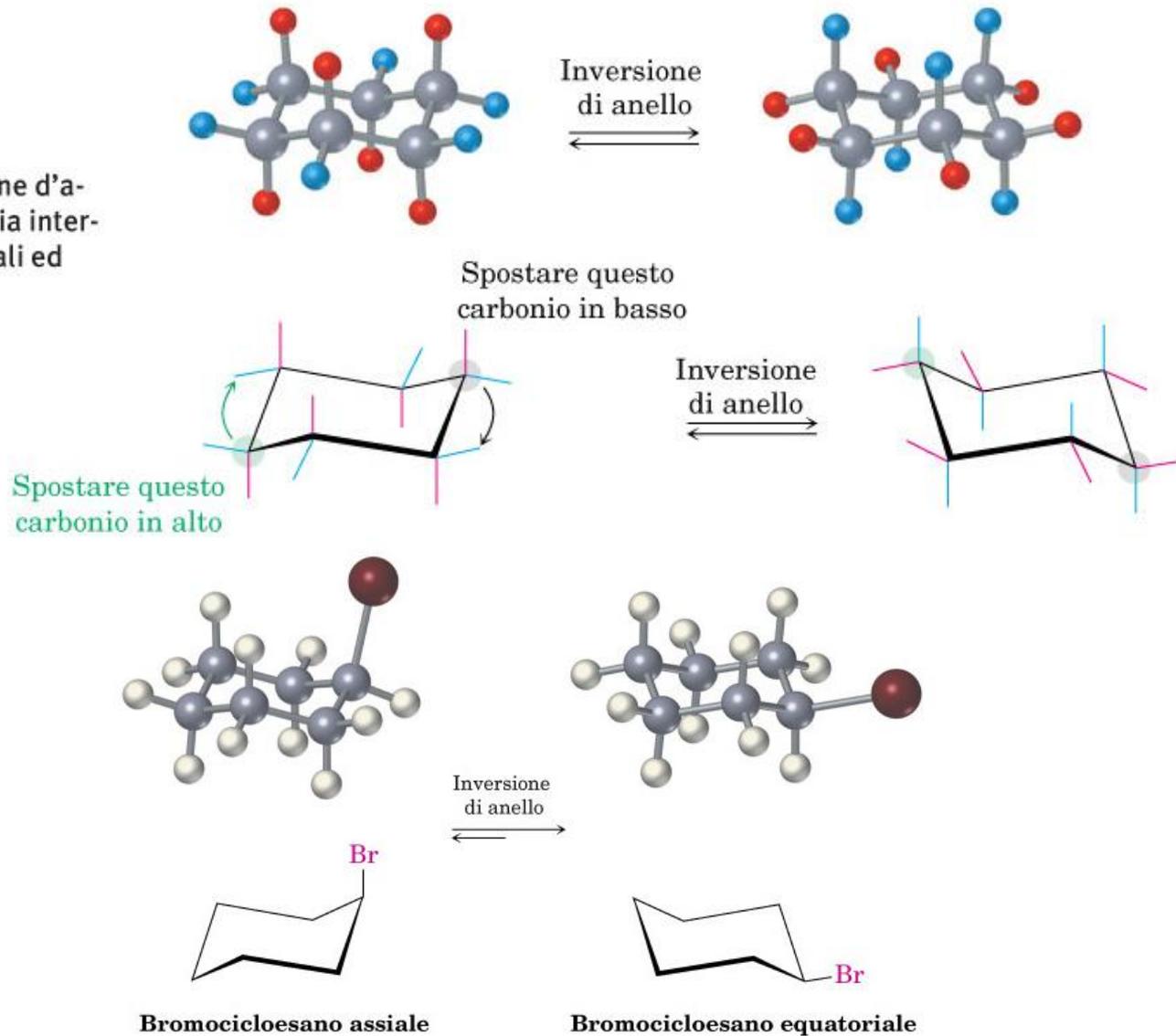


Assiali

Equatoriali

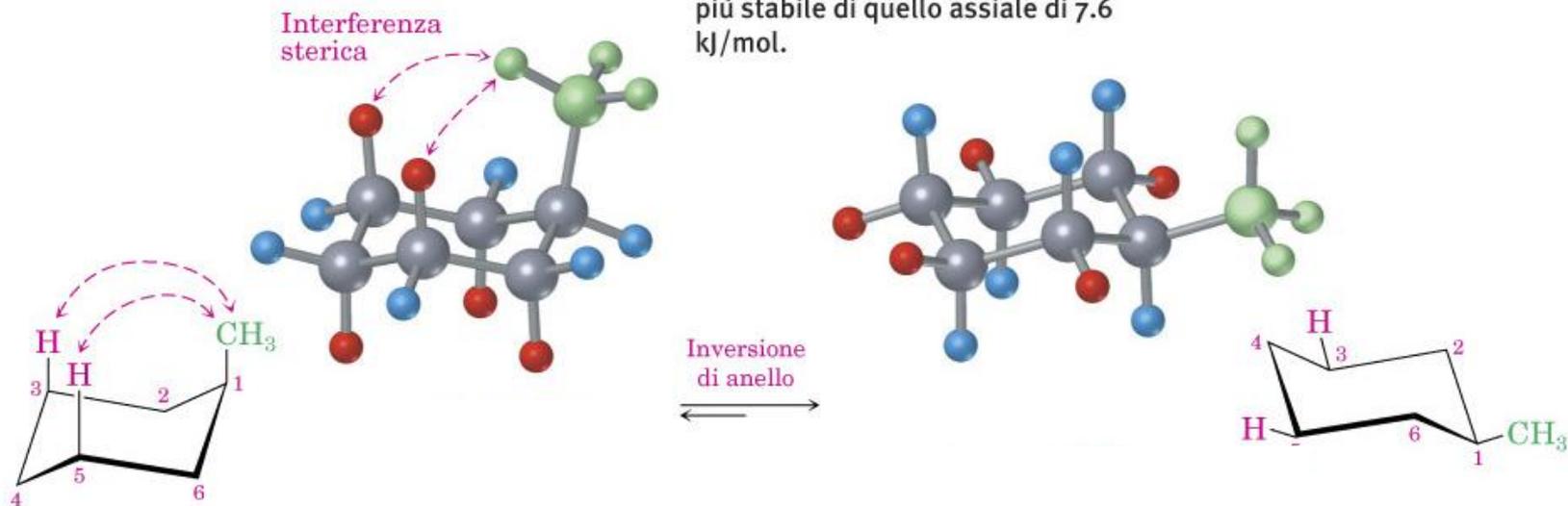
# ROTAZIONE PARZIALE ATTORNO A LEGAMI SIGMA: LE CONFORMAZIONI SONO IN EQUILIBRIO TRA LORO

**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

**FIGURA 4.19** L'interconversione assiale-equatoriale di un metilcicloesano è rappresentata in vari modi. Il conformero equatoriale è più stabile di quello assiale di 7.6 kJ/mol.



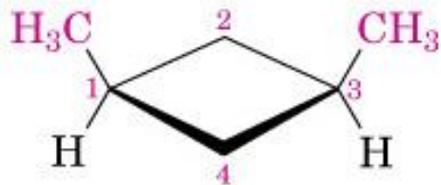
# **STEREOISOMERIA *CIS-TRANS* NEI CICLOALACANI**

# COSA SONO GLI STEREOISOMERI?

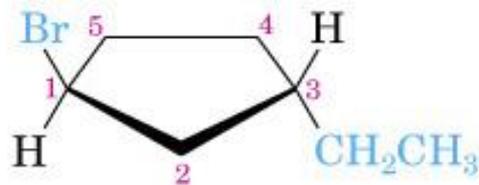
**Isomeri costituzionali**  
(differenti connessioni tra gli atomi)



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



*cis*-1,3-Dimetilciclobutano

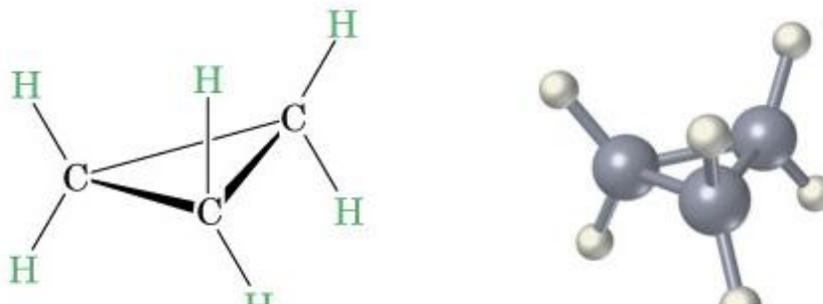


*trans*-1-Bromo-3-etilciclopentano

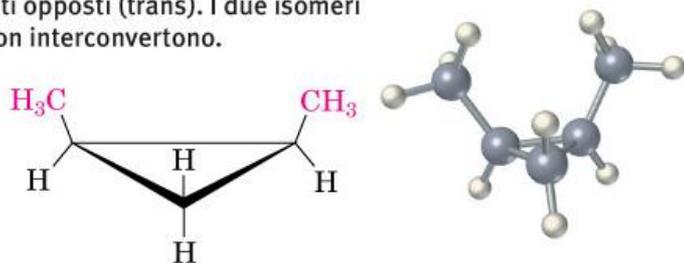
# L'ANELLO CONFERISCE RIGIDITA' ALLA MOLECOLA: LA ROTAZIONE ATTORNO AI LEGAMI C-C E' IMPEDITA.

## Isomeria *cis-trans* nei cicloalcani:

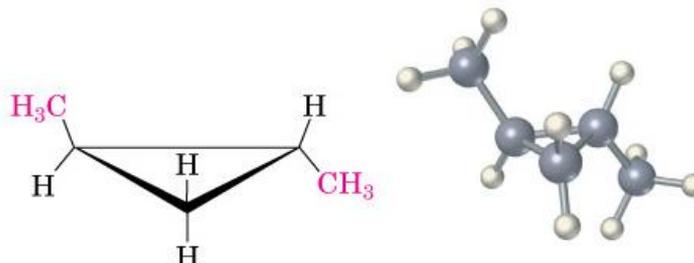
**FIGURA 3.8** Struttura del ciclopropano. La rotazione intorno ai legami carbonio-carbonio non è possibile, a meno che non si rompa l'anello.



**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



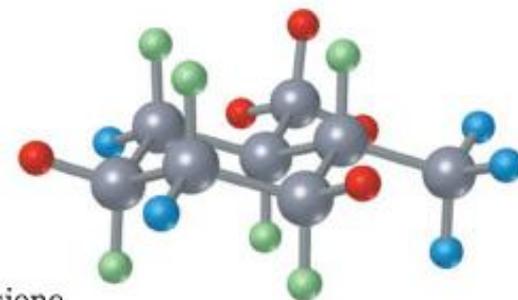
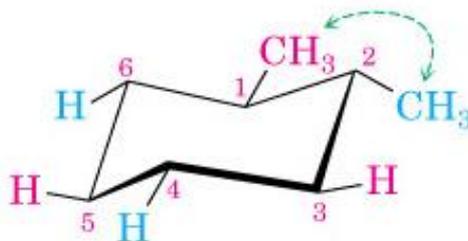
*trans*-1,2-Dimetilciclopropano

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?

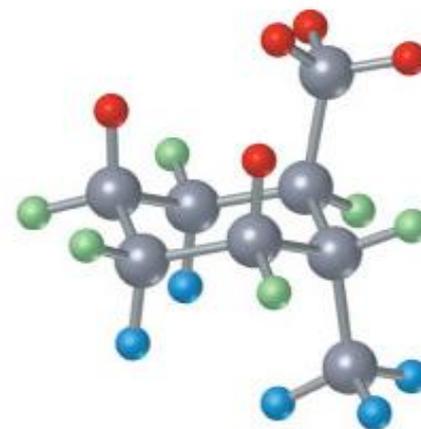
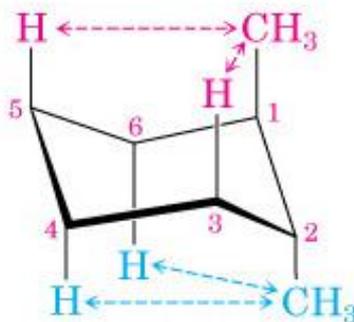
## *trans*-1,2-Dimetilcicloesano

Una interazione  
gauche (3.8 kJ/mol)



↑ Inversione  
↓ di anello

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

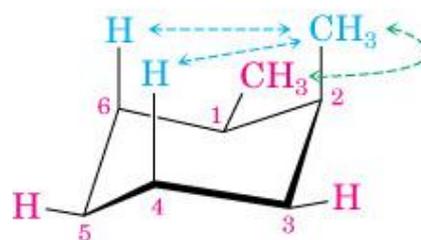


# STEREoisomero *cis* del 1,2-dimetilcicloesano:

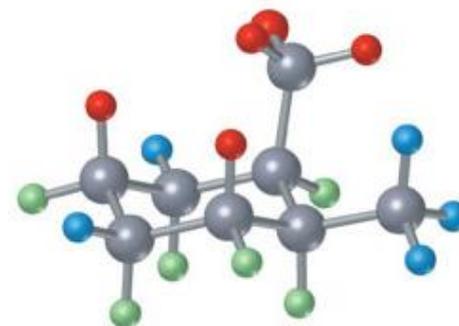
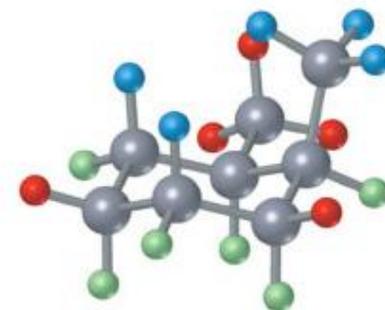
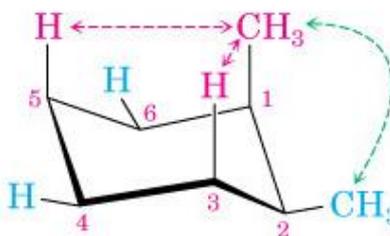
QUALE SARA' LA SUA  
CONFORMAZIONE PIU'  
STABILE?

## *cis*-1,2-Dimetilcicloesano

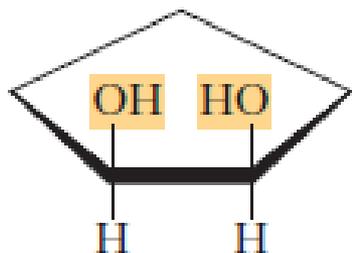
**FIGURA 4.21**  
Conformazioni del *cis*- e del *trans*-1,2-dimetilcicloesano. Nell'isomero *cis* (in alto nella figura) le due conformazioni a sedia hanno la stessa energia, in quanto entrambe posseggono un metile assiale e uno equatoriale. Nell'isomero *trans* (in basso nella figura), la conformazione 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.



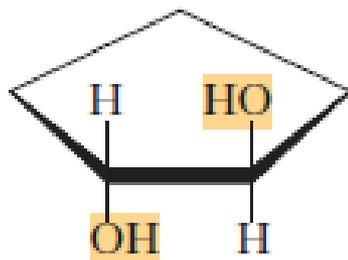
↕ Inversione  
di anello



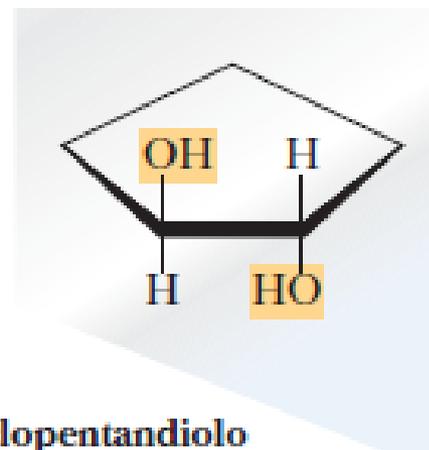
## Proiezioni di Haworth



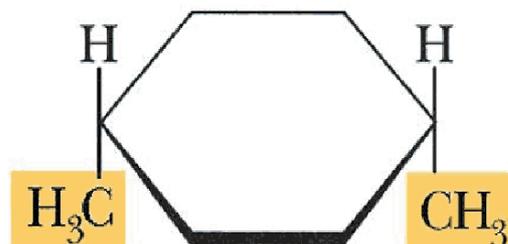
*cis*-1,2-Ciclopentandiolo



*trans*-1,2-Ciclopentandiolo



*trans*-1,4-dimetilcicloesano



*cis*-1,4-dimetilcicloesano