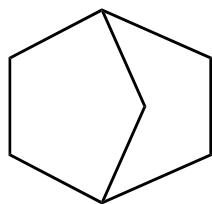
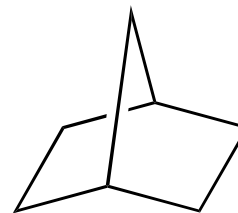


Ονομασία Δικυκλικών Ενώσεων

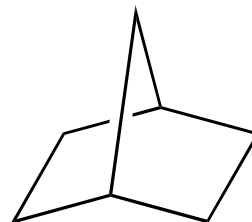
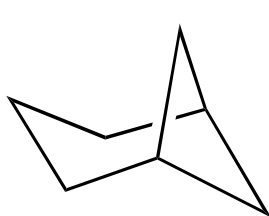
Υπάρχουν πολλές ενώσεις με **δύο** συμπικνωμένους δακτυλίους που ονομάζονται **δικυκλικές** ενώσεις.

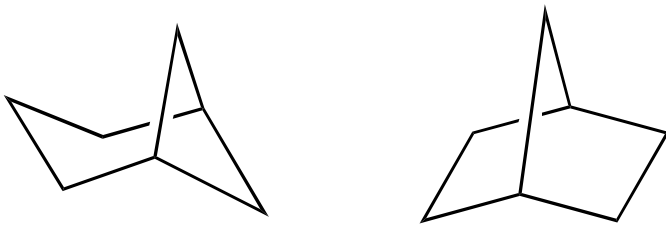


είναι το ίδιο με



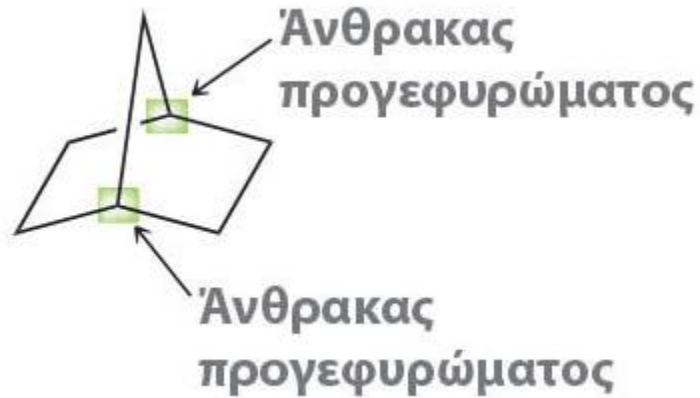
Για να ονομασθεί μία δικυκλική ένωση, εισάγεται το πρόθεμα **δίκυκλο** μπροστά από το όνομα του μητρικού σκελετού που τελειώνει σε **-άνιο**. Για παράδειγμα, οι παρακάτω ενώσεις θα μπορούσαν και οι δύο να ονομάζονται, **δίκυκλοεπτάνιο**.



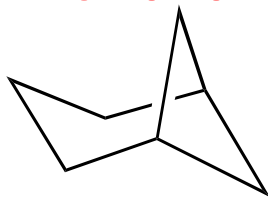


Διαφορετικές ενώσεις.

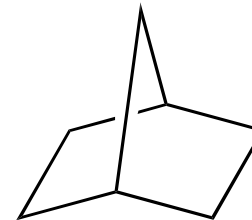
Πρέπει να υποδηλωθεί ο τρόπος δόμησης των δακτυλίων.



Σε αγκύλη δηλώνονται οι αριθμοί ατόμων C των τριών διαδρομών που ενώνουν τους C του προγεφυρώματος: **μεγάλη διαδρομή -> μικρή διαδρομή -> γέφυρα.**

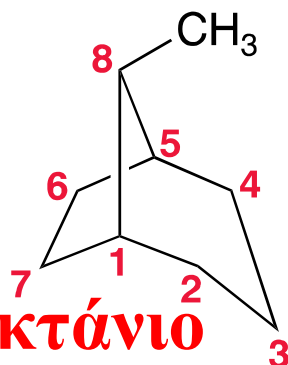


Δικυκλο[3.1.1]επτάνιο



Δικυκλο[2.2.1]επτάνιο

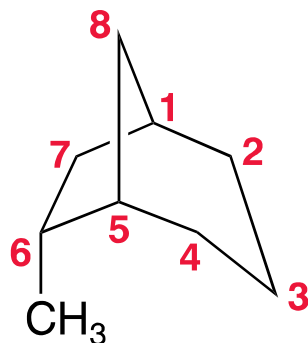
Η αρίθμηση του δικυκλικού μητρικού σκελετού αρχίζει από έναν άνθρακα προγεφυρώματος και αριθμείται πρώτα η μεγαλύτερη διαδρομή



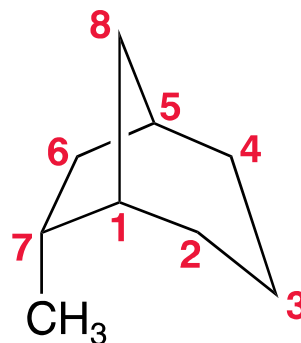
8-μεθυλοδικυκλο[3.2.1]οκτάνιο

Στους υποκαταστάτες δίνονται οι μικρότεροι δυνατοί αριθμοί θέσης.

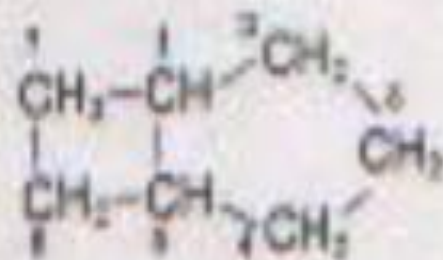
Σωστό



Λάθος

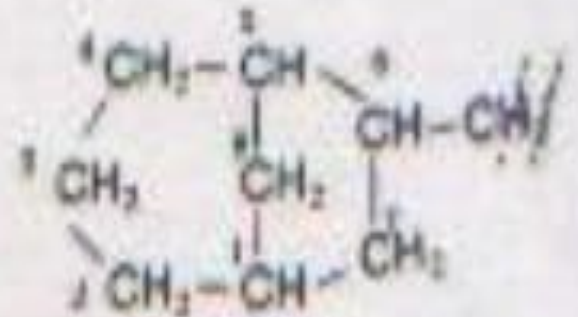


6-μεθυλοδικυκλο[3.2.1]οκτάνιο



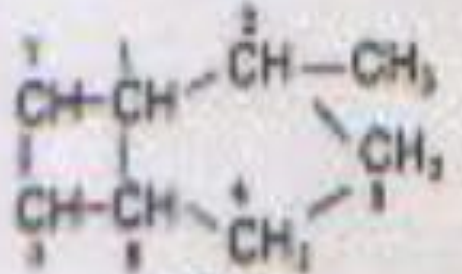
(18)

Δικυκλο[3.2.0]επτάνιο



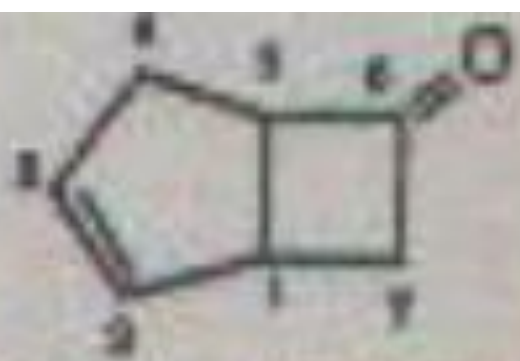
(19)

6-μεθυλο-δικυκλο[3.2.1]επτάνιο (α) 7-μεθυλο-δικυκλο ...



(20)

2-μεθυλο-δικυκλο[3.2.0]-επτάνιο (β) 4-μεθυλο-δικυκλο...



Δικυκλο[3.2.0]-2-επτάννη-6

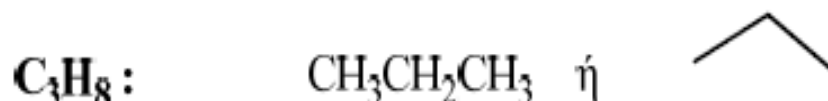
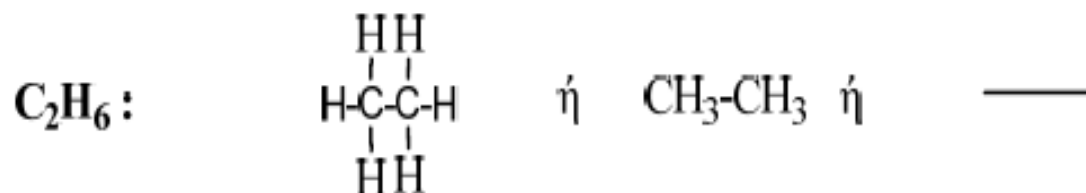
Συντακτικά Ισομερή Αλκανίων

Ο αριθμός των διαφορετικών πιθανών τρόπων σύνδεσης των ατόμων αυξάνεται σημαντικά όταν υπάρχουν περισσότερα άτομα.

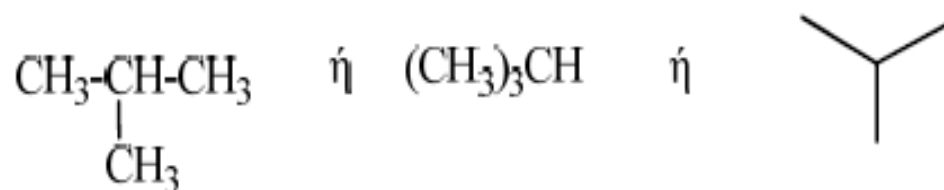
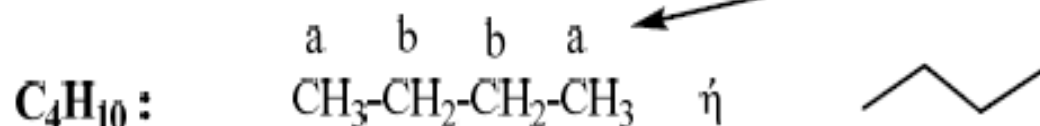
ΠΙΝΑΚΑΣ 4.4 ΑΡΙΘΜΟΣ ΣΥΝΤΑΚΤΙΚΩΝ ΙΣΟΜΕΡΩΝ ΓΙΑ ΟΡΙΣΜΕΝΑ ΑΛΚΑΝΙΑ

ΜΟΡΙΑΚΟΣ ΤΥΠΟΣ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΣΥΝΤΑΚΤΙΚΩΝ ΙΣΟΜΕΡΩΝ
C_3H_8	1
C_4H_{10}	2
C_5H_{12}	3
C_6H_{14}	5
C_7H_{16}	9
C_8H_{18}	18
C_9H_{20}	35
$C_{10}H_{22}$	75
$C_{15}H_{32}$	4.347
$C_{20}H_{42}$	366.319
$C_{30}H_{62}$	4.111.846.763
$C_{40}H_{82}$	62.481.801.147.341

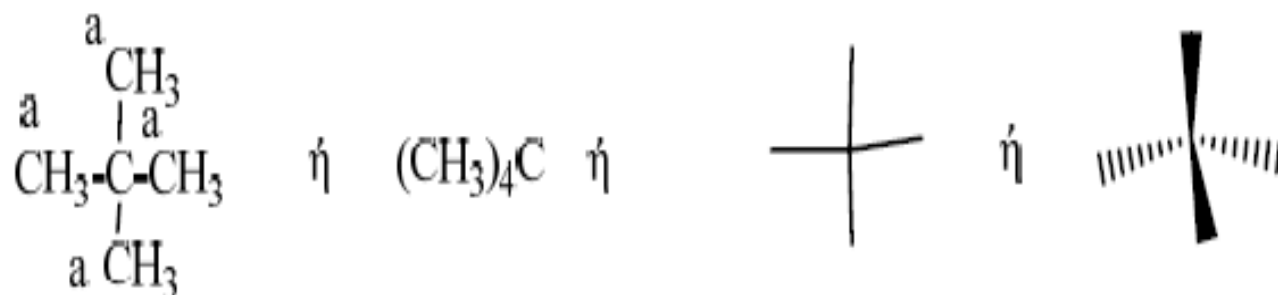
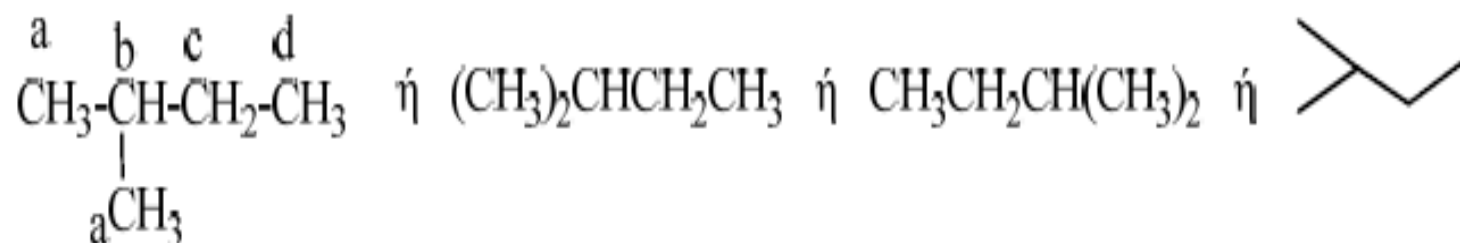
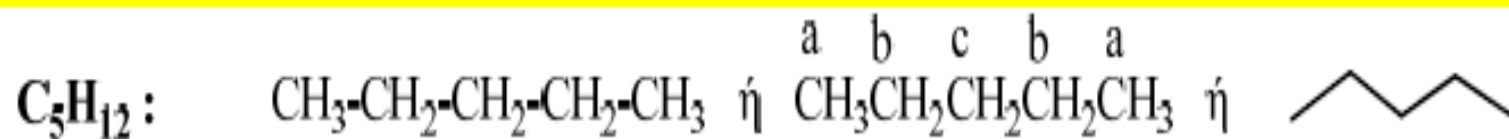
ΣΥΝΤΑΚΤΙΚΗ ΙΣΟΜΕΡΕΙΑ

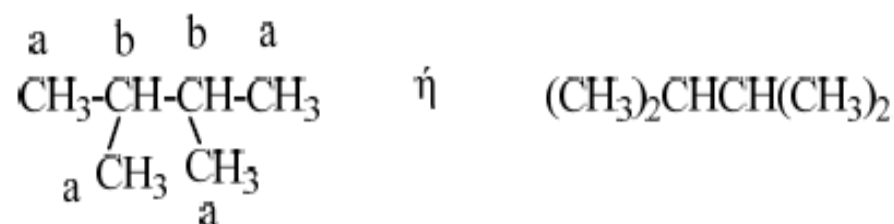
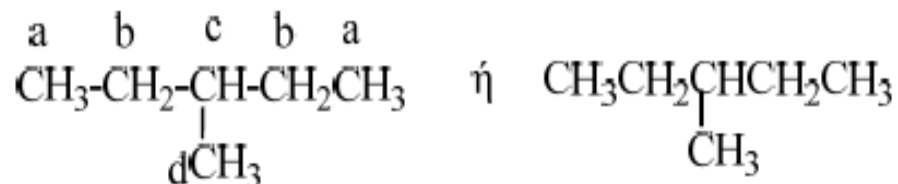
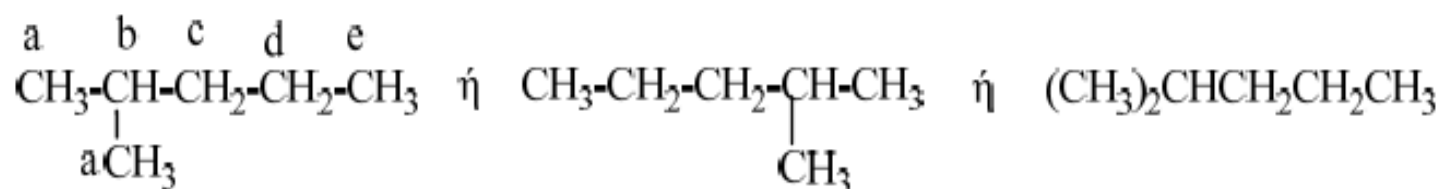
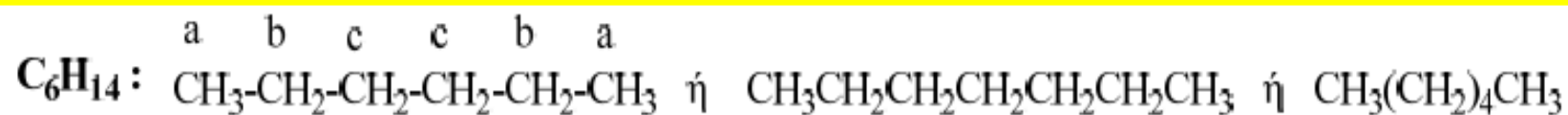


Ισομέρεια αλυσίδας ή ανθρακικού σκελετού:

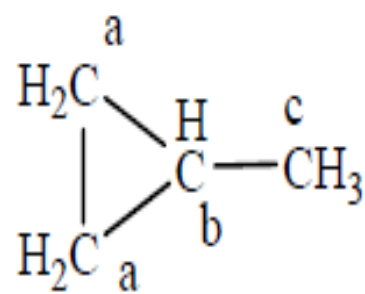
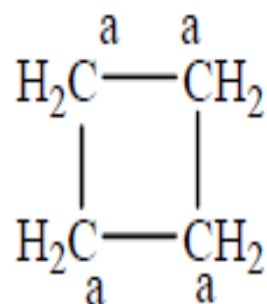
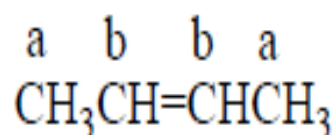
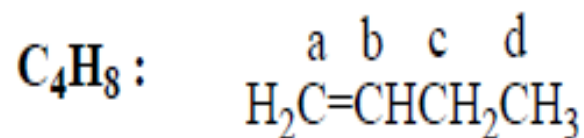


Διαφορετικοί C
με υποκαταστάτες:
Ισομέρεια θέσης
υποκαταστάτη





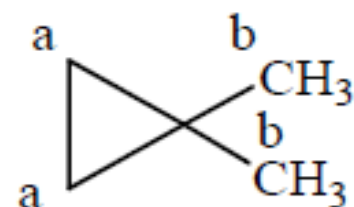
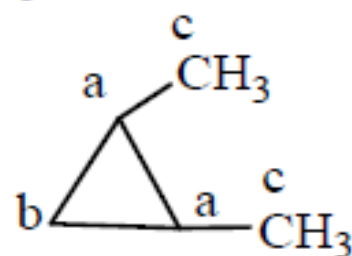
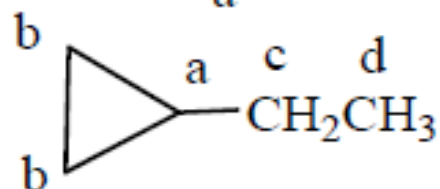
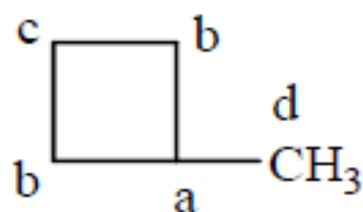
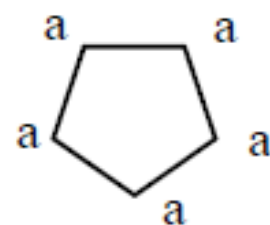
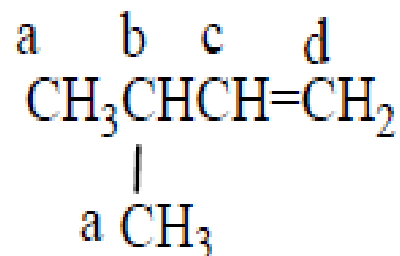
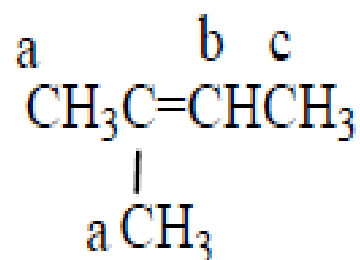
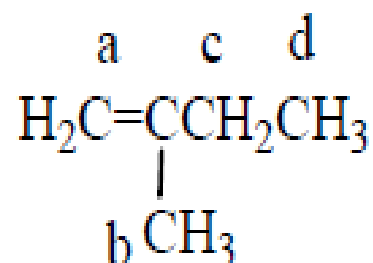
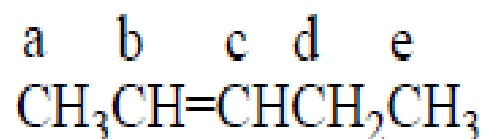
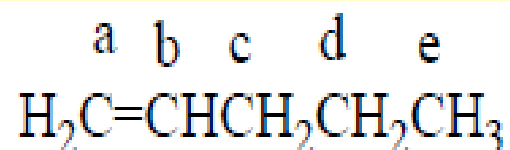
Ισομέρεια θέσης δεσμού (διπλού ή τριπλού)



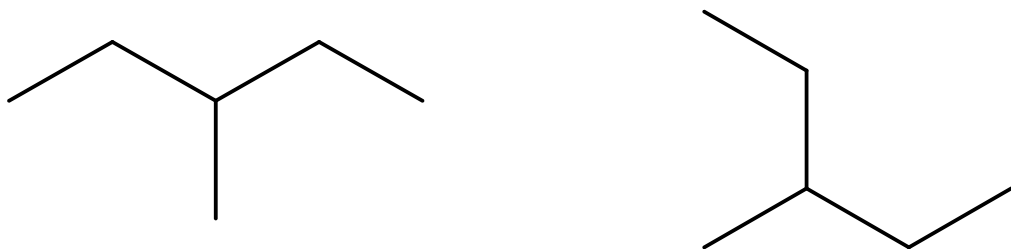
Ισομέρεια αλυσίδας-δακτυλίου



C₅H₁₀ :

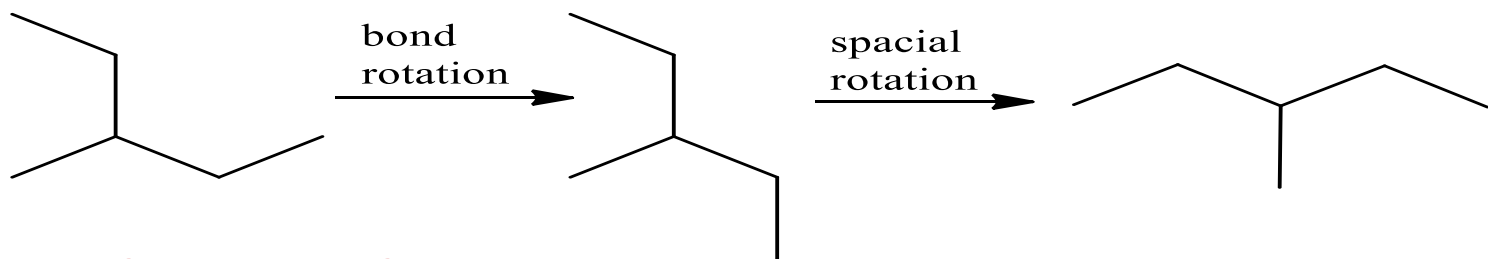


Πώς μπορεί να αναγνωρισθεί εάν δύο μόρια είναι ισομερή;



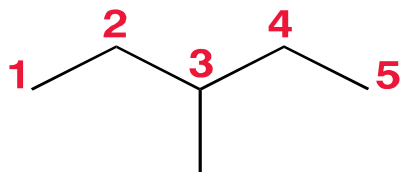
Εάν έχουν τον ίδιο μοριακό τύπο, μπορεί να είναι ισομερή ή μπορεί να είναι ταυτόσημες. Τρόποι ελέγχου:

Περιστροφή των μορίων στον τρισδιάστατο χώρο γύρω από τους απλούς δεσμούς:

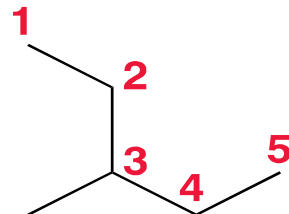


Ονομασία των ενώσεων:

Ταυτόσημες



3-Μεθυλοπεντάνιο



3-Μεθυλοπεντάνιο

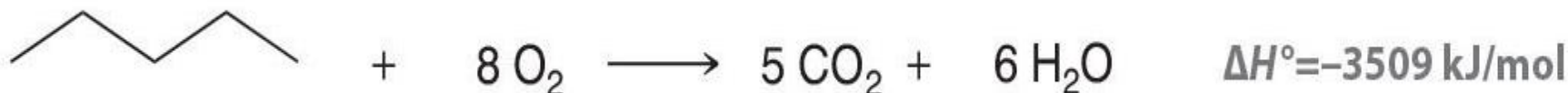
Σχετική Σταθερότητα των Ισομερών Αλκανίων

Για να αιτιολογήσουμε και να προβλέψουμε τα αποτελέσματα των χημικών αντιδράσεων, είναι χρήσιμο να εκτιμήσουμε τη σταθερότητα των ενώσεων

Σταθερή ένωση = χαμηλή δυναμική ενέργεια = χαμηλή δραστηριότητα = μικρή ποσότητα ενέργειας θα απελευθερωθεί κατά την αντίδραση

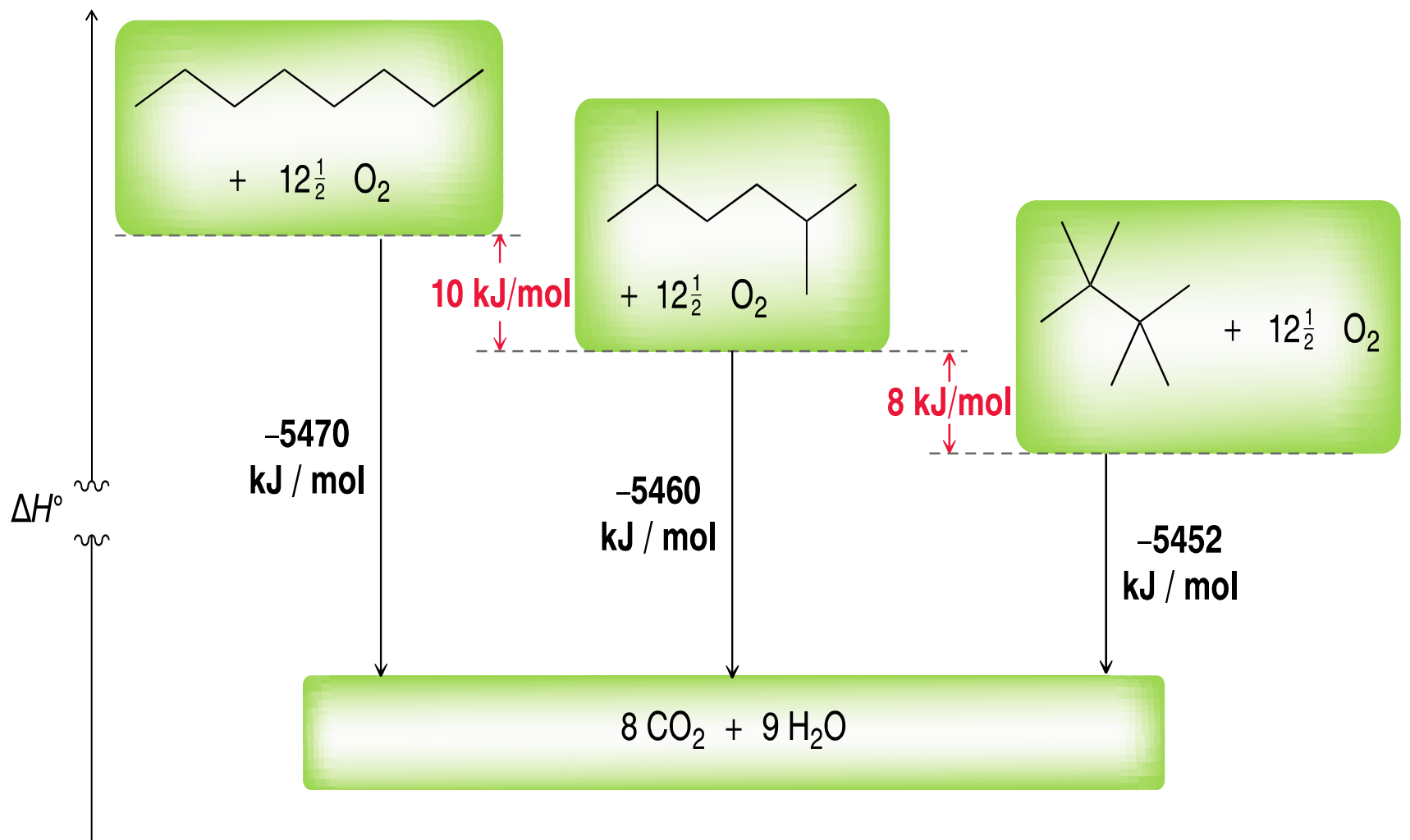
ΚΑΥΣΗ ΑΛΚΑΝΙΟΥ

ΘΕΡΜΟΤΗΤΑ ΚΑΥΣΗΣ $-\Delta H^\circ$



Οι θερμότητες καύσης είναι ένας τρόπος προσδιορισμού της σχετικής σταθερότητας των ενώσεων.

Τα διακλαδισμένα αλκάνια είναι σταθερότερα (χαμηλότερης ενέργειας).



Προέλευση και Χρήσεις των Αλκανίων

Το **πετρέλαιο**, το οποίο ετυμολογικά προέρχεται από τις λέξεις **πέτρα** και **έλαιο** είναι η κύρια πηγή των αλκανίων.

Το πετρέλαιο είναι μείγμα εκατοντάδων υδρογονανθράκων, ως επί το πλείστον αλκανίων με ποικίλους αριθμούς ατόμων άνθρακα και ποικίλους βαθμούς διακλάδωσης.

Τα αλκάνια του πετρελαίου με 5 έως 12 άτομα άνθρακα ανά μόριο είναι τα πιο πολύτιμα, και μπορούν να διαχωριστούν από το ακατέργαστο πετρέλαιο με **διύλιση**.

Το κλάσμα της βενζίνης αντιπροσωπεύει περίπου το 19% του αργού πετρελαίου, το οποίο δεν αρκεί για να καλύψει τη ζήτηση.

Διάφορα συστατικά του πετρελαίου:

ΠΙΝΑΚΑΣ 4.5 ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΧΡΗΣΕΙΣ ΤΩΝ ΚΛΑΣΜΑΤΩΝ ΤΟΥ ΠΕΤΡΕΛΑΙΟΥ

ΕΥΡΟΣ ΣΗΜΕΙΩΝ ΖΕΣΕΩΝ ΤΟΥ ΚΛΑΣΜΑΤΟΣ (°C)	ΑΡΙΘΜΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ ΣΤΑ ΜΟΡΙΑ	ΧΡΗΣΕΙΣ
Κάτω από 20	C_1-C_4	Φυσικό αέριο, πετροχημικά, πλαστικά
20–100	C_5-C_7	Διαλύτες
20–200	C_5-C_{12}	Βενζίνη
200–300	$C_{12}-C_{18}$	Κηροζίνη, καύσιμα αεριωθούμενων
200–400	C_{12} και ανώτεροι	Λάδι θέρμανσης, ντίζελ
Μη πτητικά υγρά	C_{20} και ανώτεροι	Λιπαντικά, λίπος
Μη πτητικά στερεά	C_{20} και ανώτεροι	Κηροί, άσφαλτος, πίσσα

Σε θερμοκρασία δωματίου

Τα μικρά αλκάνια με 1-4 άτομα άνθρακα είναι αέρια.

Τα μεσαίου μεγέθους αλκάνια με 5-12 άτομα άνθρακα είναι υγρά.

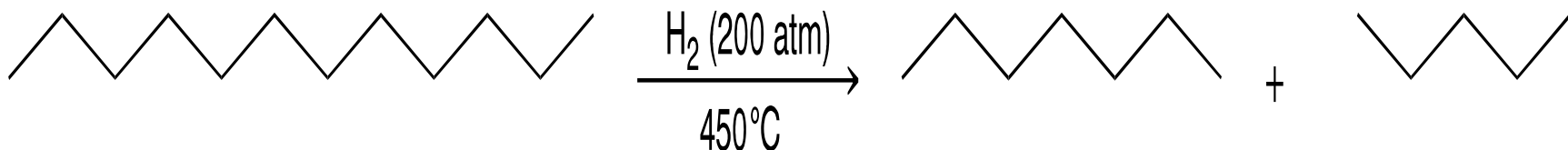
Τα μεγάλα αλκάνια με 13-20 άτομα άνθρακα είναι έλαια

Τα ακόμη μεγαλύτερα αλκάνια με 20-100 άτομα άνθρακα είναι στερεά όπως πίσσα και κηροί.

Τα πολύ μεγάλου μεγέθους αλκάνια που καλούνται πολυμερή μπορεί να έχουν χιλιάδες ή εκατομμύρια ατόμων άνθρακα σε κάθε μόριο.

Η βενζίνη είναι ένα **μείγμα υδρογονανθράκων ευθείας αλυσίδας, διακλαδισμένων και αρωματικών** (μεγέθους 5-12 ατόμων άνθρακα).

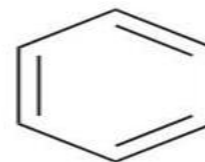
Τα μεγάλα αλκάνια μπορούν να διασπαστούν σε μικρότερα μόρια μέσω **Πυρόλυσης**.



Τα αλκάνια ευθείας αλυσίδας μπορούν να μετατραπούν σε διακλαδισμένα αλκάνια και αρωματικές ενώσεις μέσω **Αναμόρφωσης** (διάφορες αντιδράσεις: αφυδρογόνωση, ισομερείωση κλπ).



2,2,4-Τριμεθυλοπεντάνιο
Ένα διακλαδισμένο αλκάνιο



Βενζόλιο
Μια αρωματική ένωση

Μετά τη χρήση αυτών των διαδικασιών, η απόδοση σε βενζίνη **ανέρχεται σε περίπου 47% αντί του 19%**.

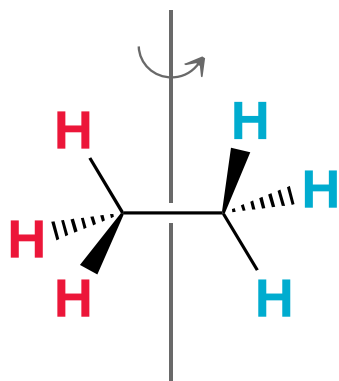
Προβολές Newman

Οι απλοί δεσμοί στα μόρια μπορούν να περιστρέφονται.

Οι διαφορετικές τρισδιάστατες δομές εκ περιστροφής καλούνται **διαμορφώσεις**.

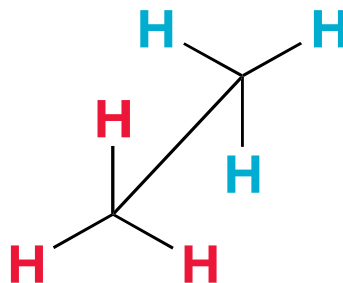
Οι τρισδιάστατες περιστροφικές διαμορφώσεις είναι δύσκολο να αναπαρασταθούν στο δισδιάστατο χαρτί.

Τρεις τρόποι αναπαράστασης του αιθανίου:



Με πλήρεις και
διακεκομμένες
σφηνοειδείς γραμμές

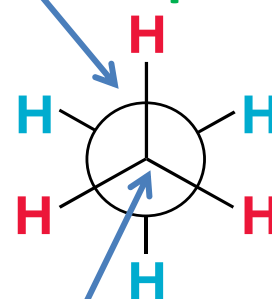
Περιστροφή κατά 45°



Πλαγιογωνιακή
αναπαράσταση

Περιστροφή κατά 90°

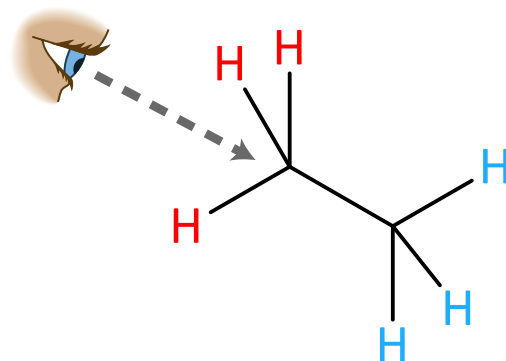
Πίσω άνθρακας



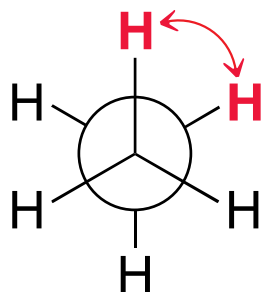
Προβολή Newman

Εμπρός άνθρακας

Η προβολή κατά Newton σχεδιάζεται βλέποντας το μόριο κατά μήκος του άξονα που συνδέει τα δύο άτομα C. Το μπροστινό σχεδιάζεται σαν κουκκίδα και το πίσω σαν κύκλος.



Στην προβολή Newton το μέγεθος της γωνίας μεταξύ των ατόμων H στο ίδιο άτομο άνθρακα φαίνεται σαν να είναι 120° .

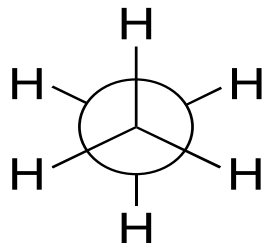


Διέδρη γωνία ή γωνία στρέψης

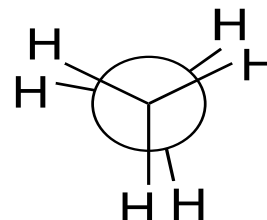
Διέδρη γωνία = 60°

Ανάλυση Διαμόρφωσης του Αιθανίου και του Προπανίου

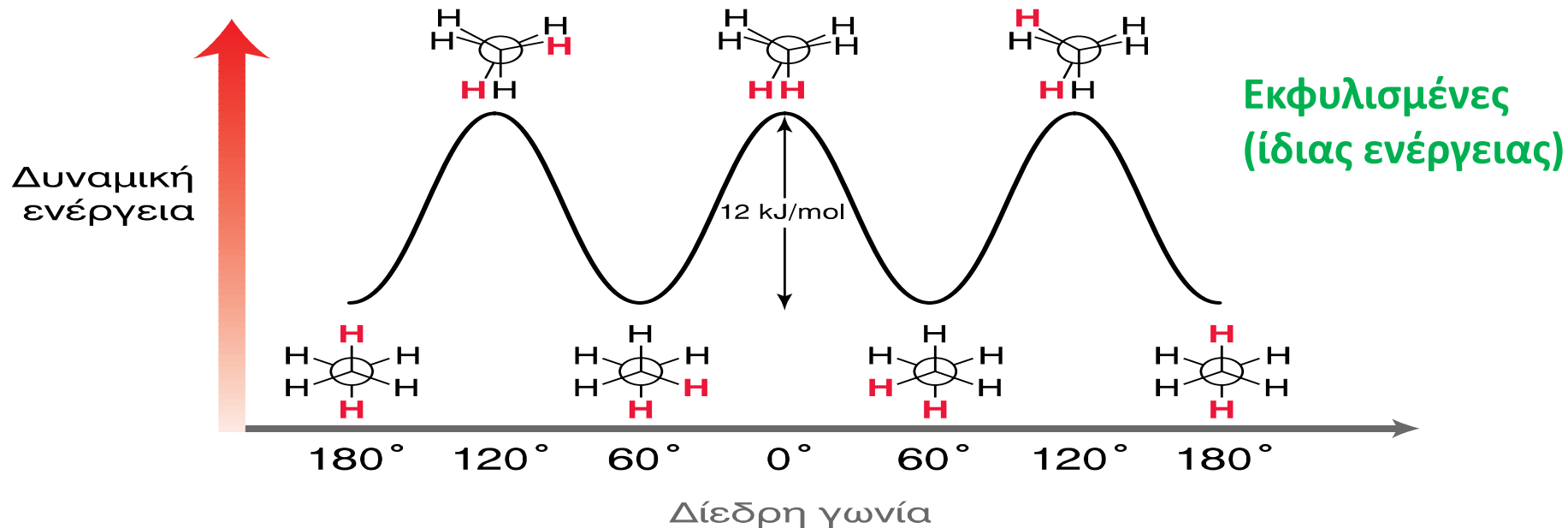
Εάν το αιθάνιο περιστραφεί κατά περίπου 60° γύρω από το δεσμό C-C, τα άτομα H στα παρακείμενα άτομα άνθρακα επισκιάζουν το ένα το άλλο.



Διαβαθμισμένη διαμόρφωση
ελάχιστης ενέργειας

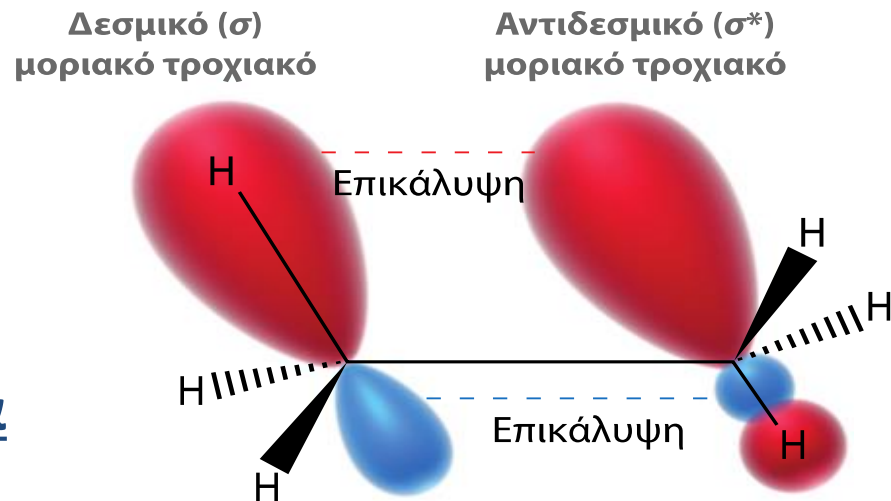


Εκλειπτική διαμόρφωση
μέγιστης ενέργειας

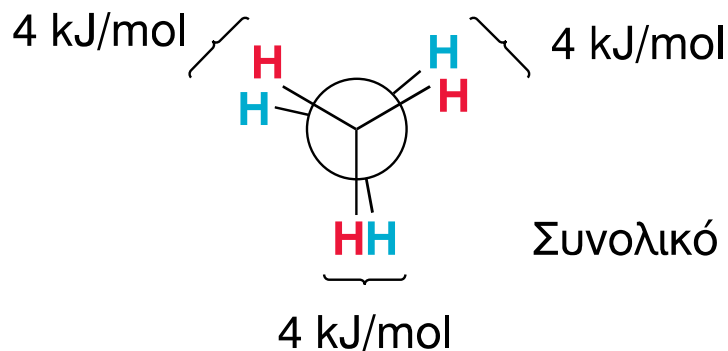


Η διαφορά ενέργειας μεταξύ της διαβαθμισμένης και της εκλειπτικής διαμόρφωσης ονομάζεται **τάση στρέψης ή περιστροφική τάση**.

Εξήγηση τάσης στρέψης με τη θεωρία ΜΟ. Στη διαβαθμισμένη διαμόρφωση, τα δεσμικά και αντιδεσμικά μοριακά τροχιακά των γειτονικών ατόμων άνθρακα επικαλύπτονται.

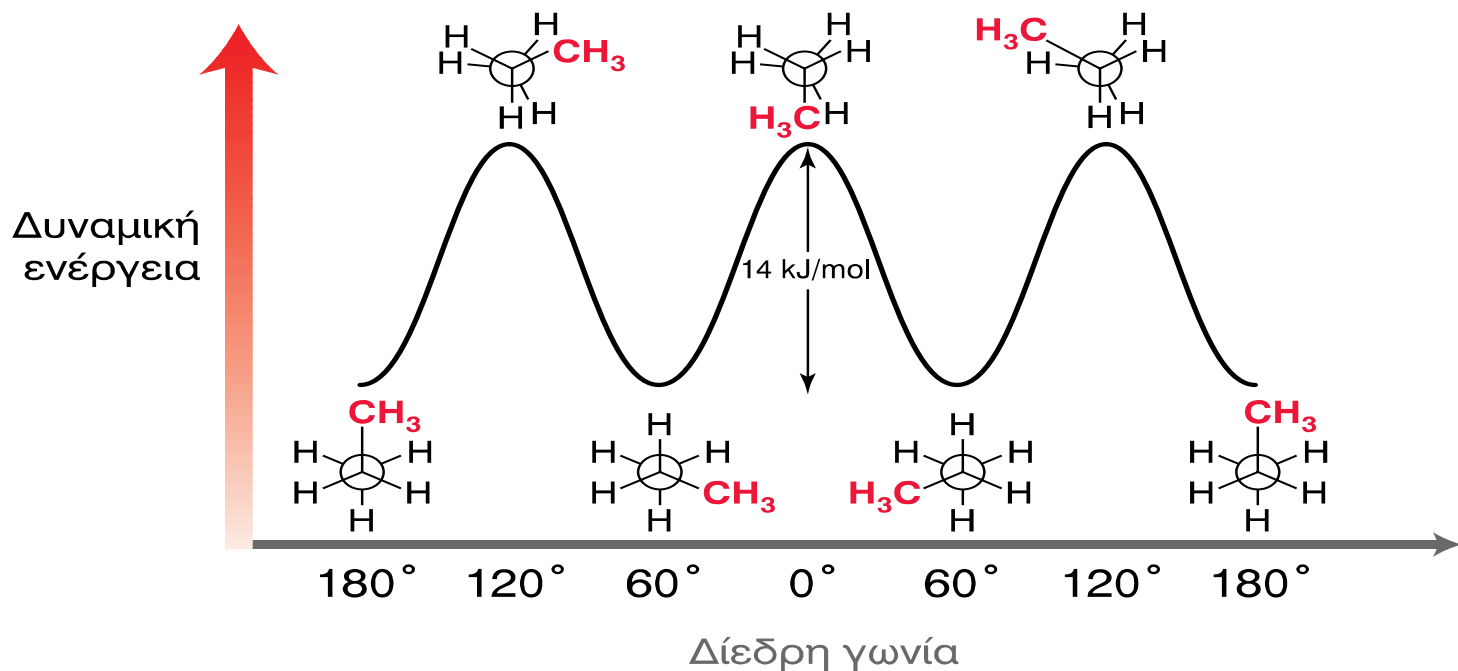


Με μία διαφορά 12 kJ/mol στη σταθερότητα, σε θερμοκρασία δωματίου, **το 99% των μορίων θα βρίσκεται σε διαβαθμισμένη διαμόρφωση**.

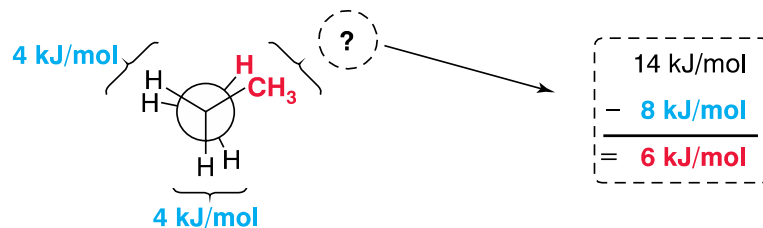


Συνολικό κόστος = 12 kJ/mol

Η ανάλυση της τάσης στρέψης του προπανίου δείχνει μία παρόμοια κατάσταση.



Η **τάση στρέψης** του προπανίου είναι 14 kJ/mol, 2 kJ/mol μεγαλύτερη εκείνης του Αιθανίου...



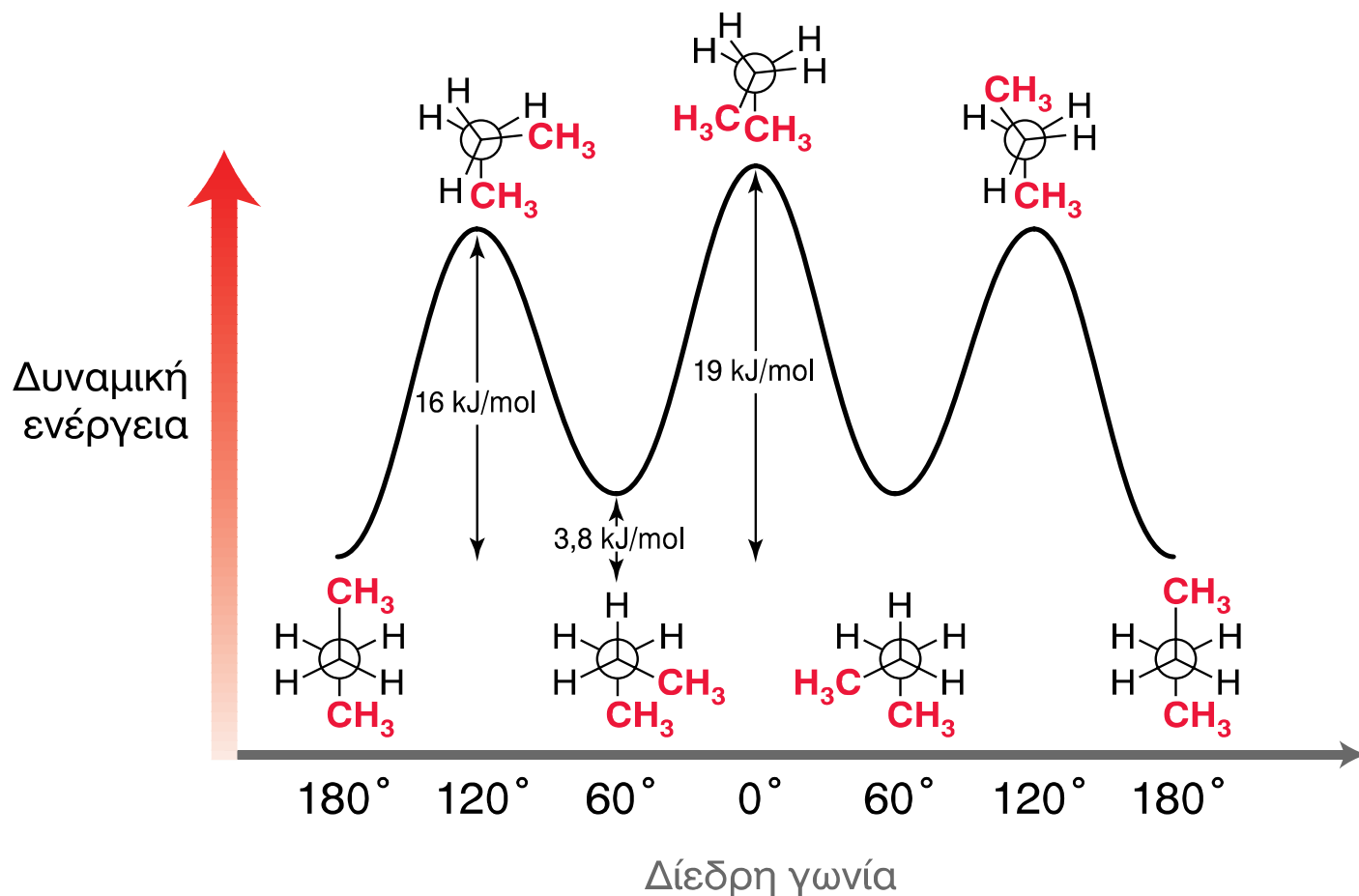
...και ήδη γνωρίζουμε ότι κάθε ζεύγος εκλειπτικών υδρογόνων έχει ενεργειακό κόστος 4 kJ/mol...

...τότε μπορούμε να υπολογίσουμε ότι το ενεργειακό κόστος μιας εκλειπτικής αλληλεπίδρασης ενός μεθυλίου με ένα υδρογόνο είναι 6 kJ/mol.

Ανάλυση Διαμόρφωσης του Βουτανίου

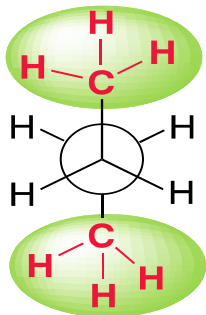
Η ανάλυση της τάσης στρέψης του βουτανίου παρουσιάζει μεγαλύτερη ποικιλομορφία.

Υπάρχουν
πολλαπλές
διαβαθμισμένες
διαμορφώσεις
και πολλαπλές
εκλειπτικές
διαμορφώσεις.



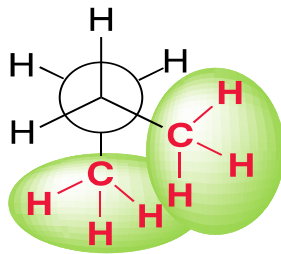
Η σταθερότητα των διαφορετικών διαβαθμισμένων διαμορφώσεων διαφέρει κατά 3.8 kJ/mol.

Η **anti** διαμόρφωση έχει μικρότερη στεreoχημική παρεμπόδιση.



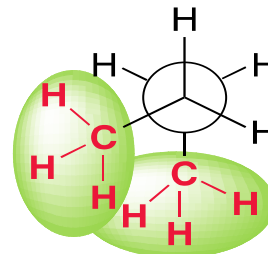
Anti

Οι μέθυλο ομάδες βρίσκονται στη μεγαλύτερη απόσταση



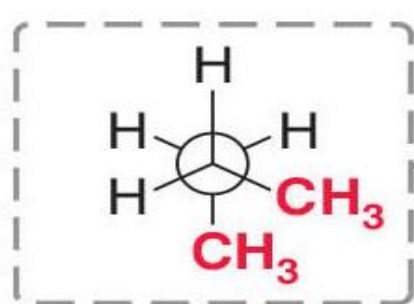
Gauche

Οι μέθυλο ομάδες υφίστανται αλληλεπίδραση *gauche*



Gauche

Οι μέθυλο ομάδες υφίστανται αλληλεπίδραση *gauche*

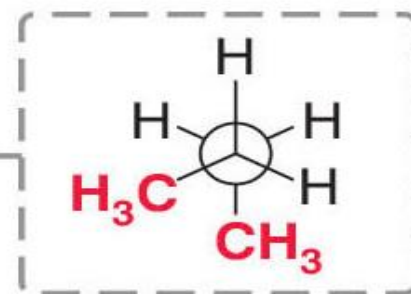


Gauche



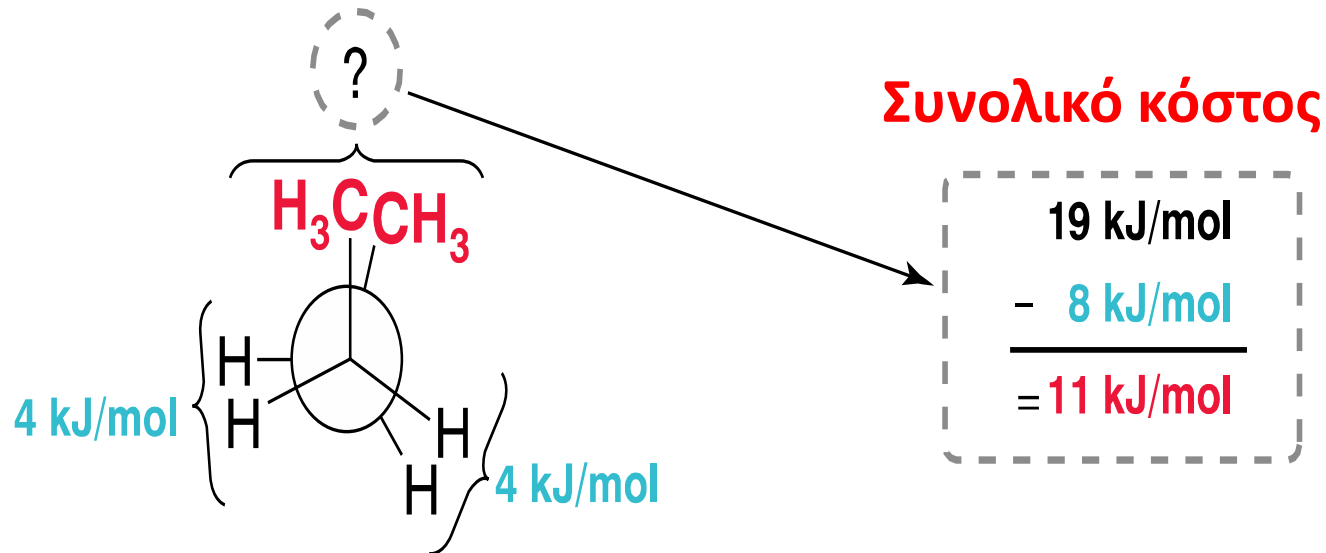
εκφυλισμένες

3,8 kJ/mol



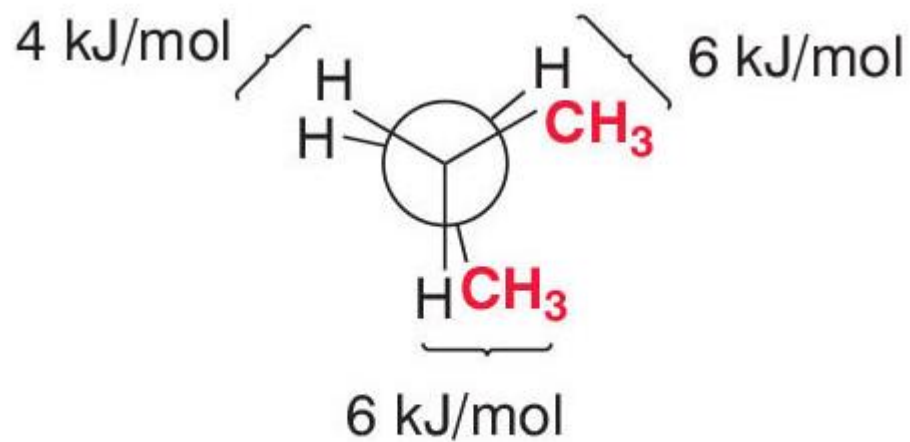
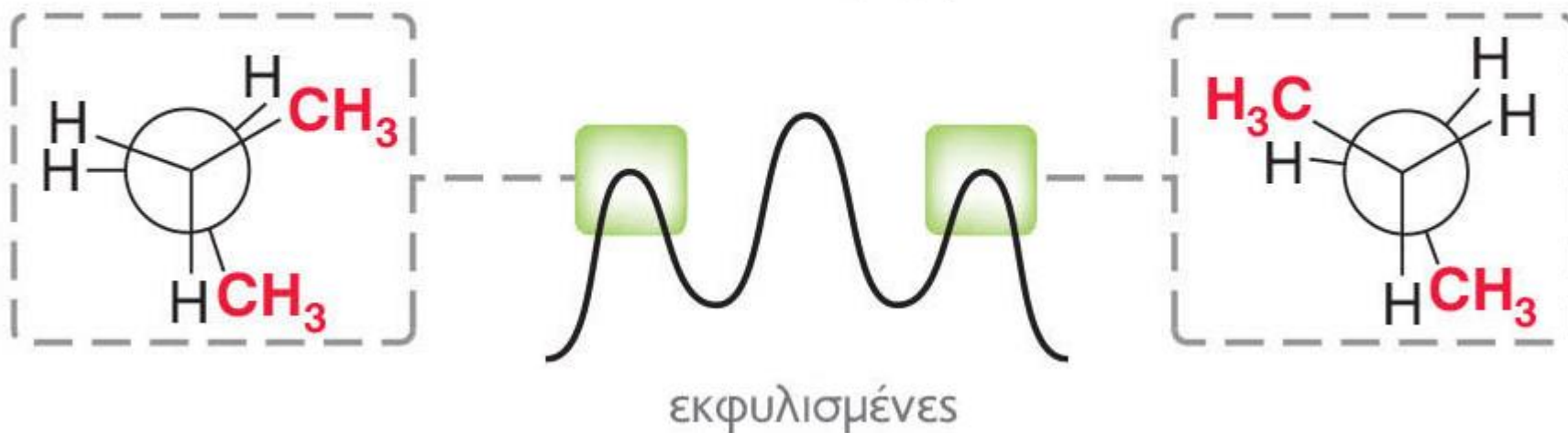
Gauche

Η ασταθέστερη διαμόρφωση προκύπτει όταν οι μέθυλο ομάδες επισκιάζουν η μία την άλλη (είναι εκλειπτικές).



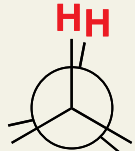
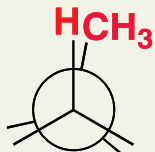
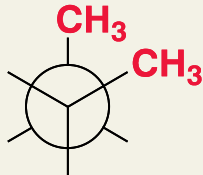
Κάθε εκλειπτική αλληλεπίδραση $\text{CH}_3\text{-----CH}_3$ δικαιολογεί 11 kJ/mol ενέργειας (τάση στρέψης και στεreoχημική τάση).

εκλειπτικές διαμορφώσεις



Συνολικό κόστος = 16 kJ/mol

ΠΙΝΑΚΑΣ 4.6 ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΟ ΚΟΣΤΟΣ ΓΙΑ ΤΗ ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΗΣ ΣΧΕΤΙΚΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΦΩΣΕΩΝ

ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗ	ΕΙΔΟΣ ΤΑΣΗΣ	ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΟ ΚΟΣΤΟΣ (KJ/MOL)
 Εκλειπτική H/H	<u>Τάση στρέψης</u>	4
 Εκλειπτική CH ₃ /H	<u>Τάση στρέψης</u>	6
 Εκλειπτική CH ₃ /CH ₃	<u>Τάση στρέψης και στερεοχημική τάση</u>	11
 <i>Gauche</i> CH ₃ /CH ₃	<u>Στερεοχημική τάση</u>	3,8