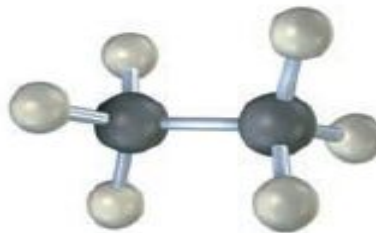
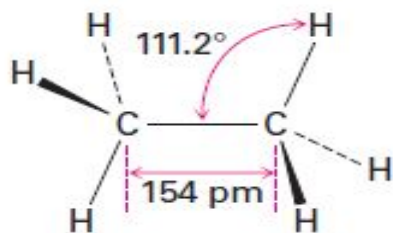
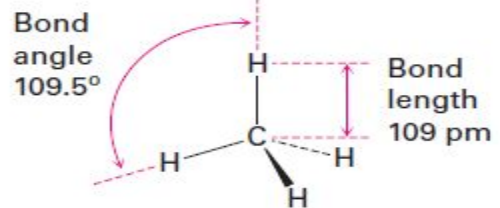


АЛКАНЫ

(строение и изомерия)



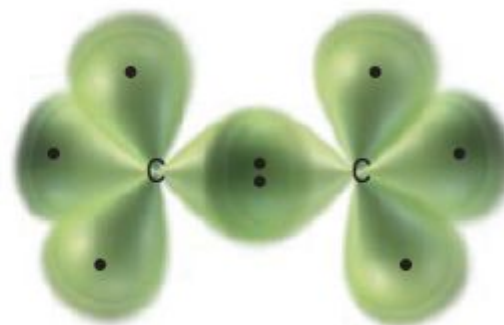
Ethane



sp^3 carbon



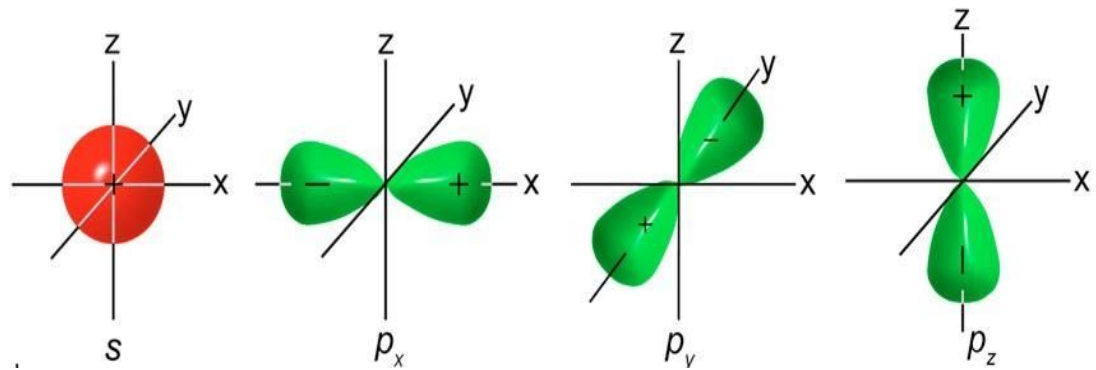
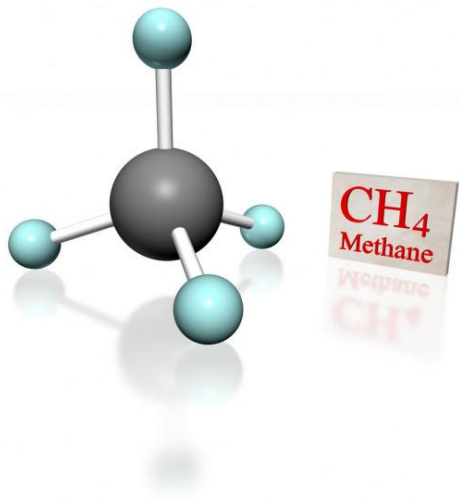
sp^3 carbon



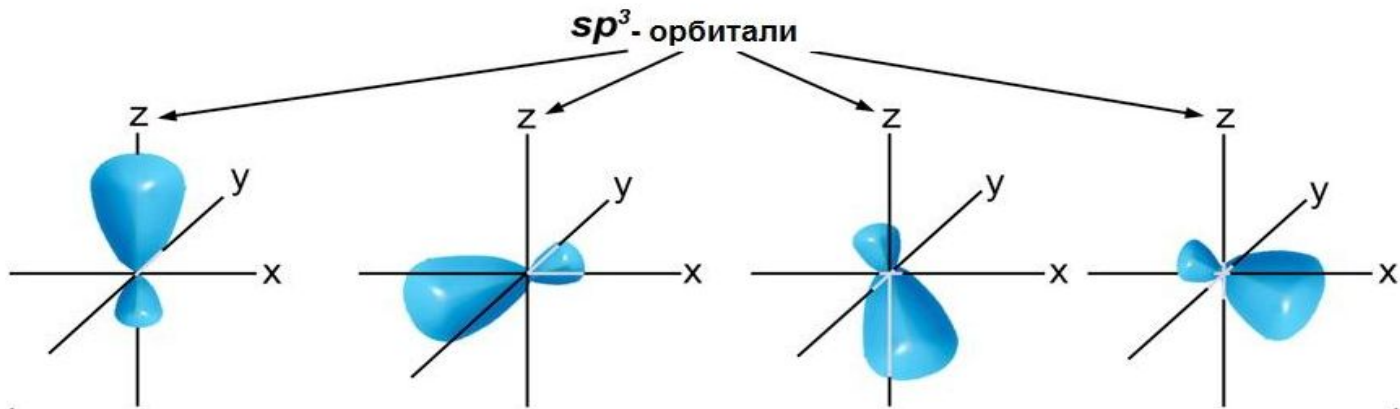
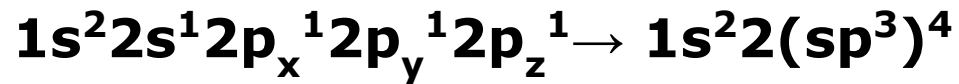
sp^3-sp^3 σ bond

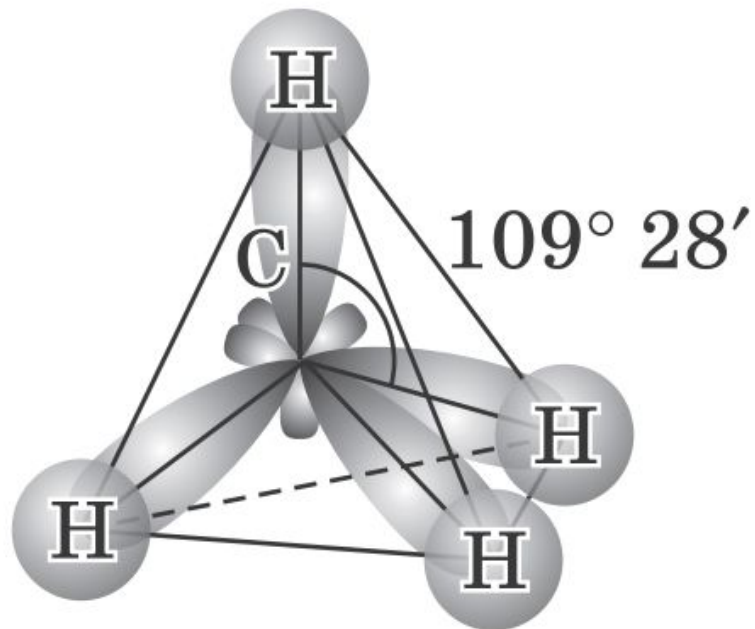


Hexane



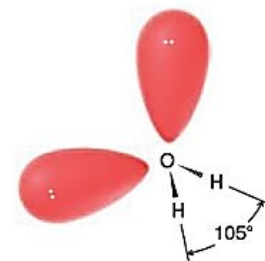
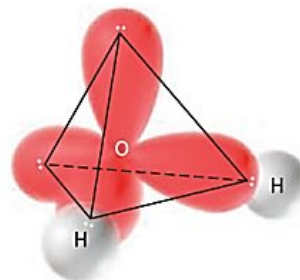
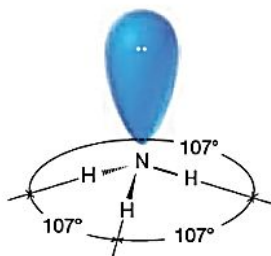
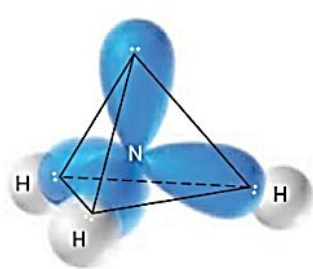
Гибридизация атомных орбиталей (АО) – гипотетический процесс смешения разных (s , p , d , f) близких по энергии орбиталей центрального атома многоатомной молекулы с возникновением одинаковых орбиталей, эквивалентных по своим характеристикам (форме и энергии).





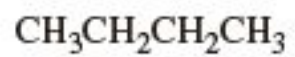
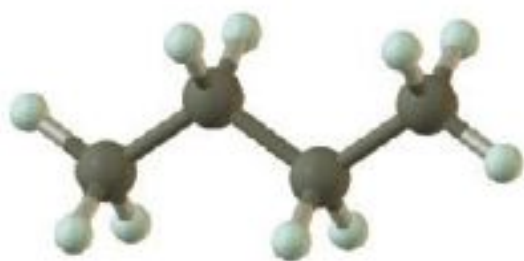
Валентный угол – угол, образованный направлениями химических (ковалентных) связей, исходящими из одного атома

Все четыре $\text{C}-\text{H}$ связи образуются вдоль воображаемых осей координат, то есть являются **σ -связями**.





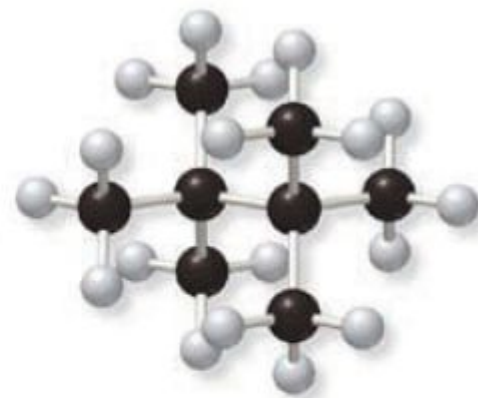
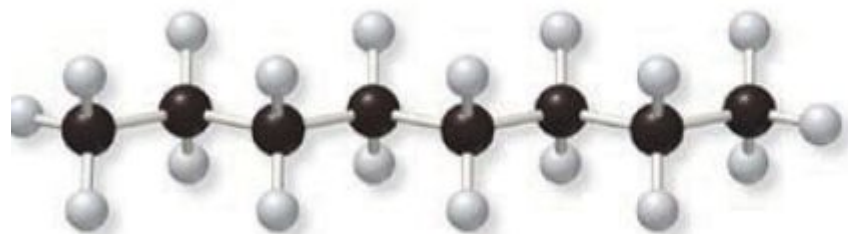
Propane

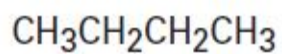
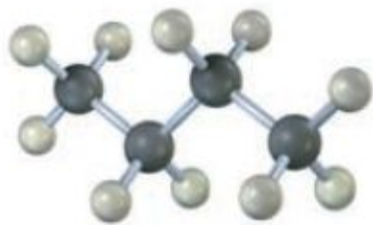


Butane

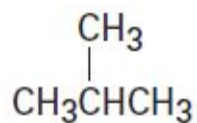


Pentane





Butane, C₄H₁₀



Isobutane, C₄H₁₀
(2-methylpropane)

Formula

**Number
of isomers**

C₆H₁₄

5

C₇H₁₆

9

C₈H₁₈

18

C₉H₂₀

35

C₁₀H₂₂

75

C₁₅H₃₂

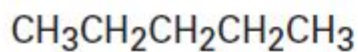
4,347

C₂₀H₄₂

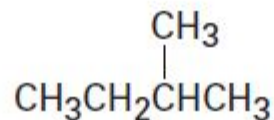
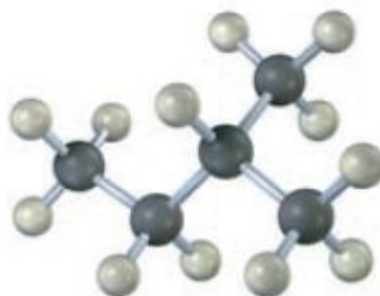
366,319

C₃₀H₆₂

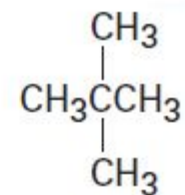
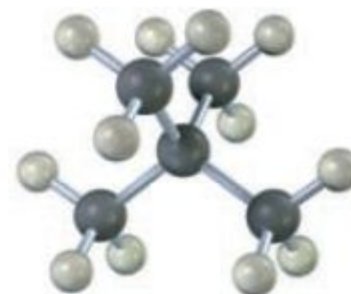
4,111,846,763



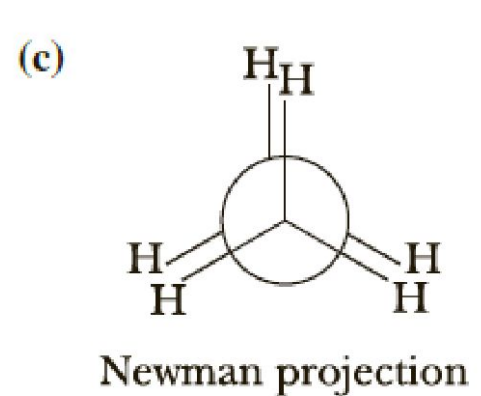
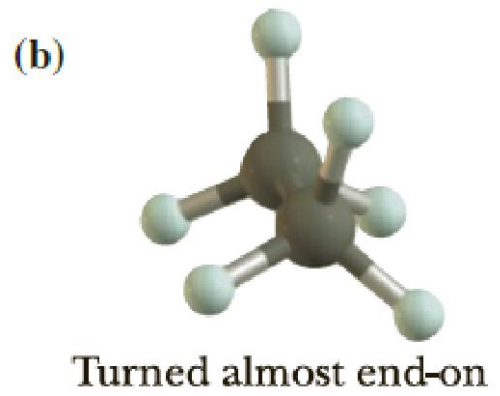
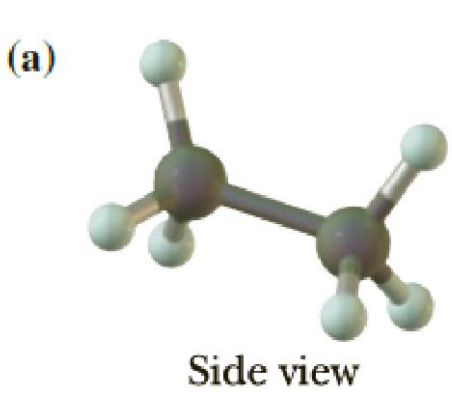
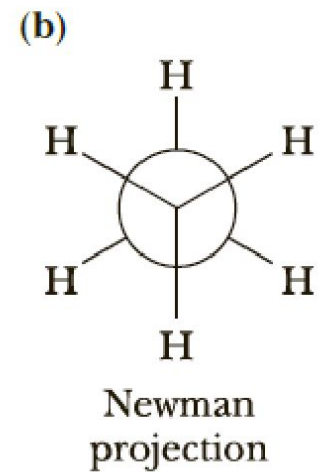
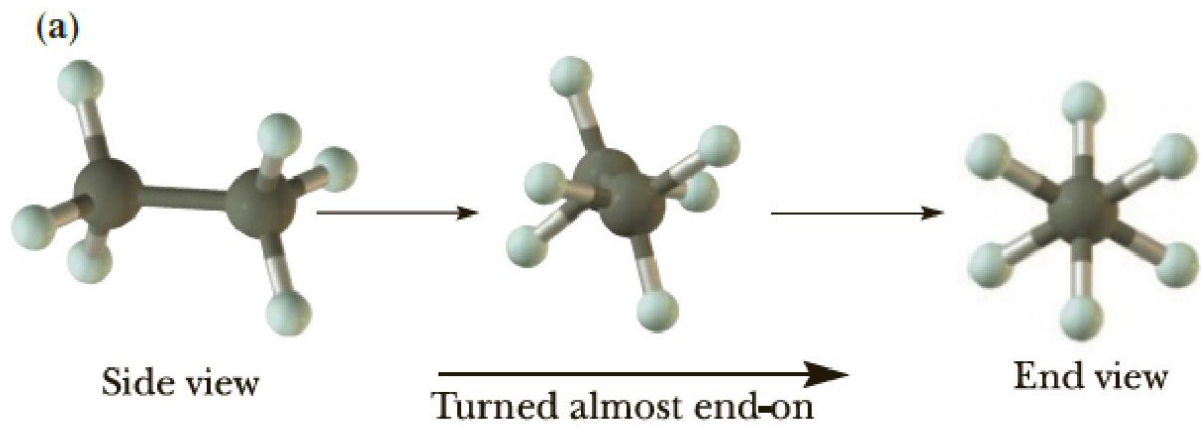
Pentane, C₅H₁₂

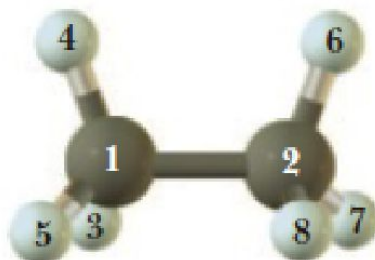
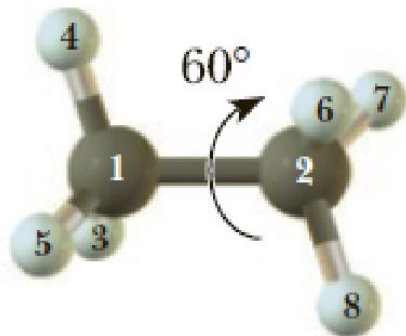
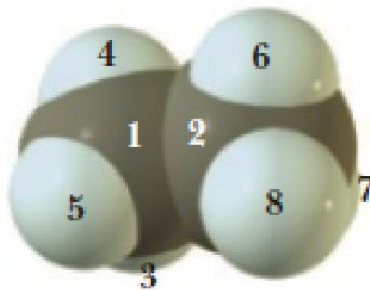
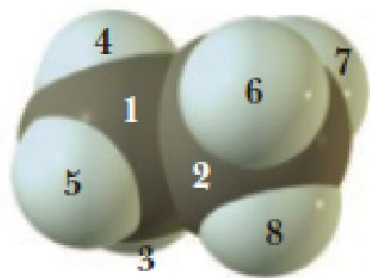


2-Methylbutane, C₅H₁₂



2,2-Dimethylpropane, C₅H₁₂



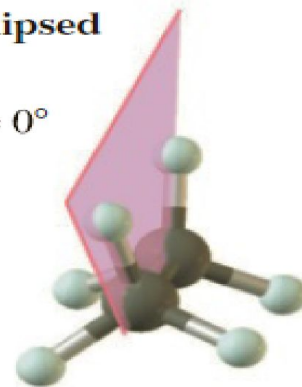


Ethane
staggered conformation

Ethane
eclipsed conformation

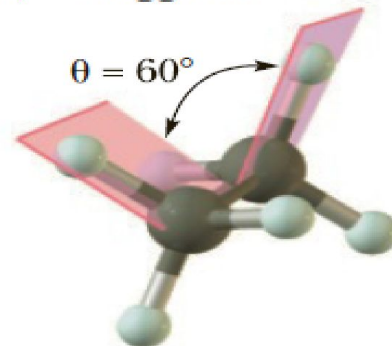
(a) **Eclipsed**

$$\theta = 0^\circ$$

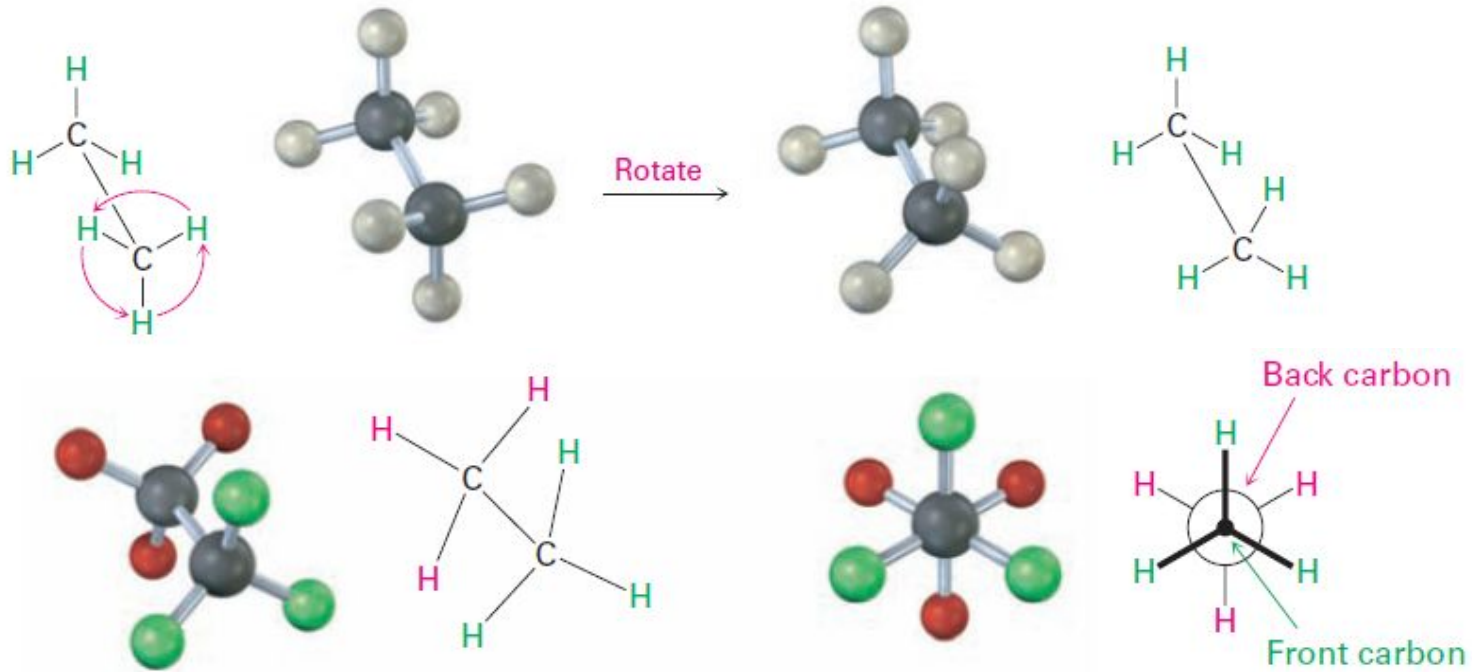


(b) **Staggered**

$$\theta = 60^\circ$$

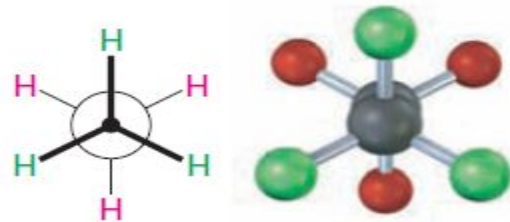


Конформации этана



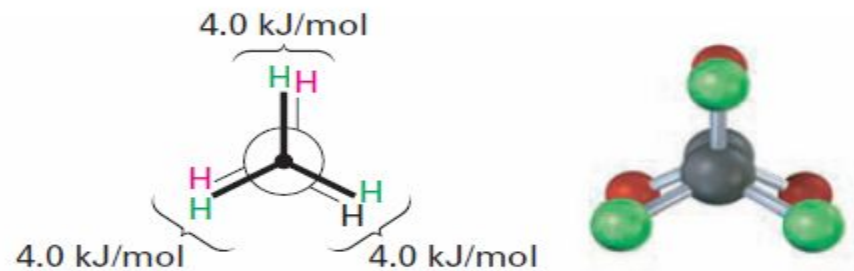
Sawhorse representation

Newman projection

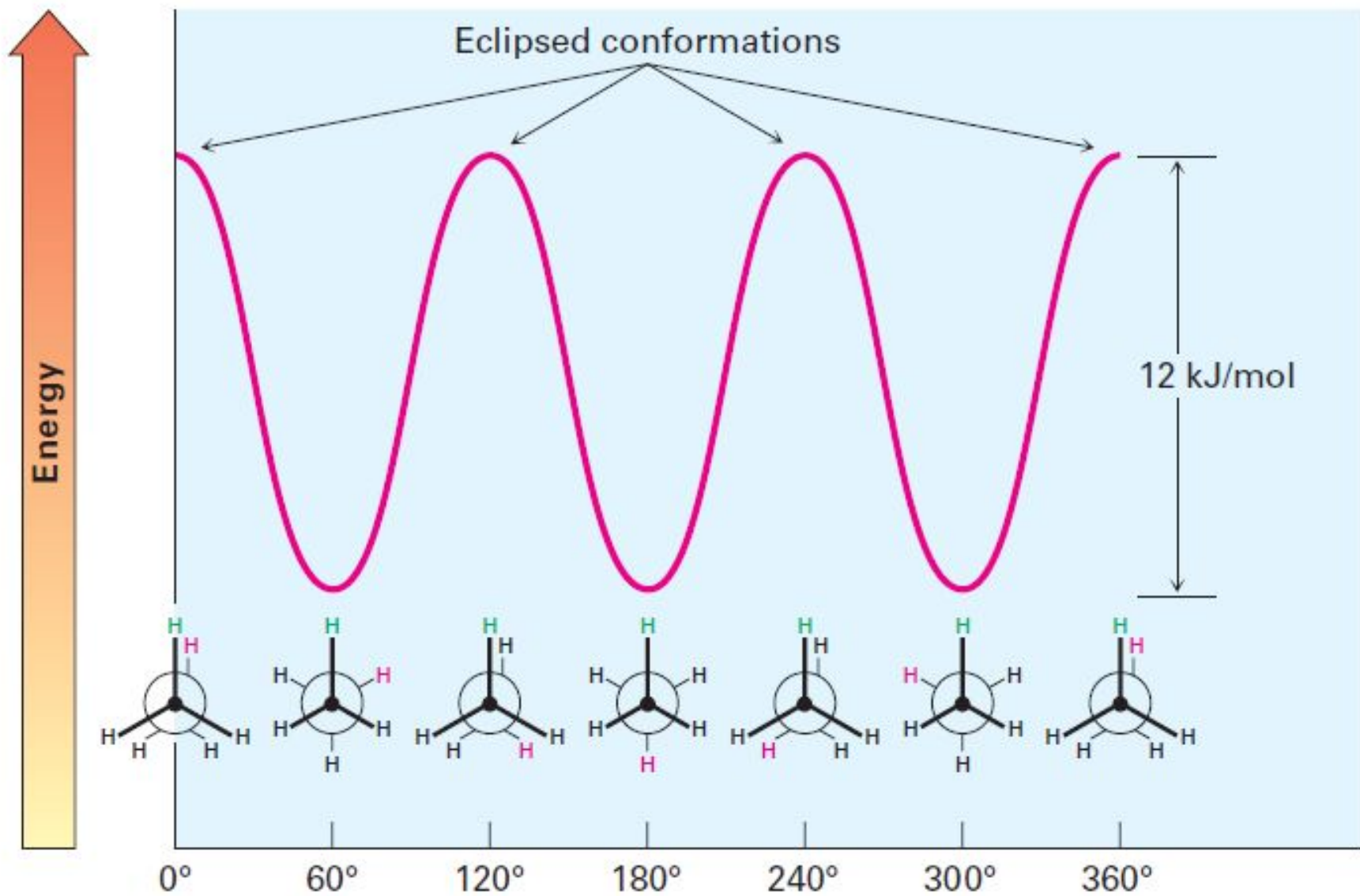


Ethane—staggered conformation

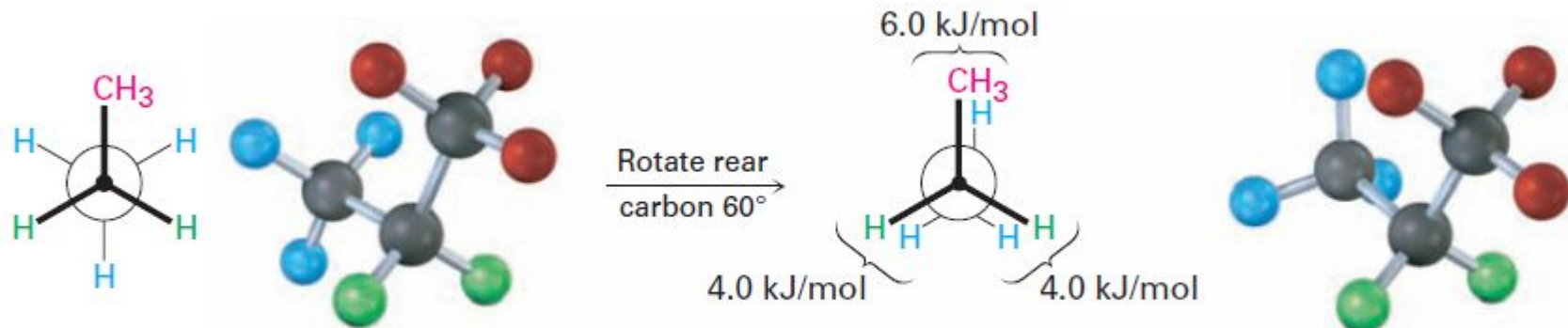
Rotate rear carbon 60°



Ethane—eclipsed conformation

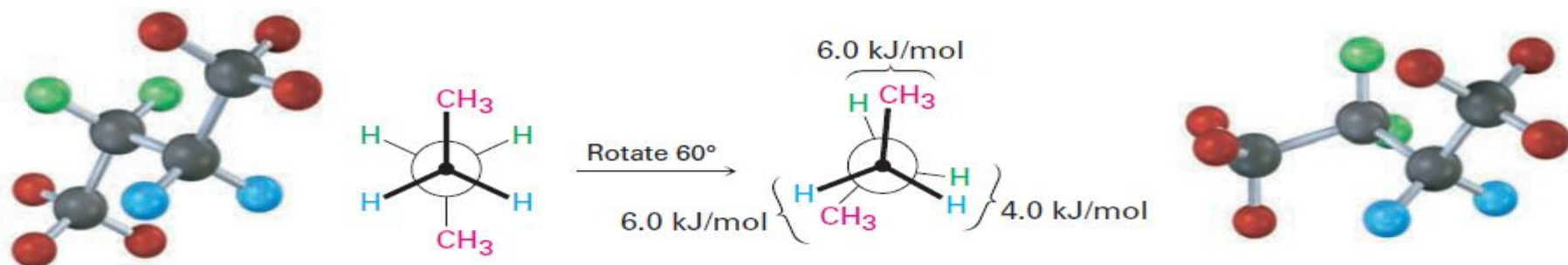


Конформации пропана и бутана



Staggered propane

Eclipsed propane

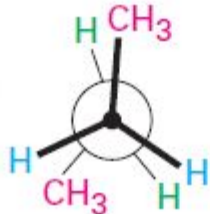


Butane — anti conformation (0 kJ/mol)

Butane — eclipsed conformation (16 kJ/mol)

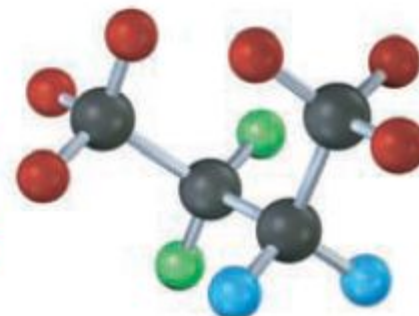
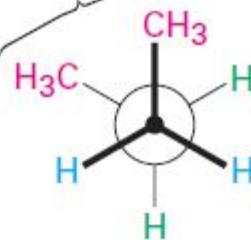


**Butane—eclipsed
conformation
(16 kJ/mol)**

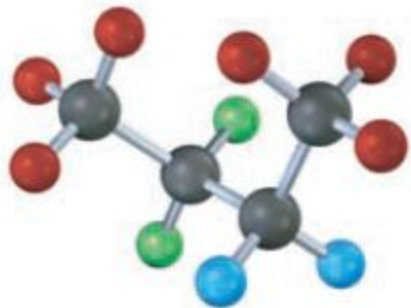


Rotate 60°

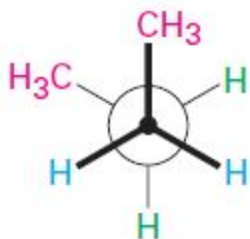
Steric strain
3.8 kJ/mol



**Butane—gauche
conformation
(3.8 kJ/mol)**



**Butane—gauche
conformation
(3.8 kJ/mol)**



Rotate 60°

11 kJ/mol



4.0 kJ/mol

4.0 kJ/mol



**Butane—eclipsed
conformation
(19 kJ/mol)**

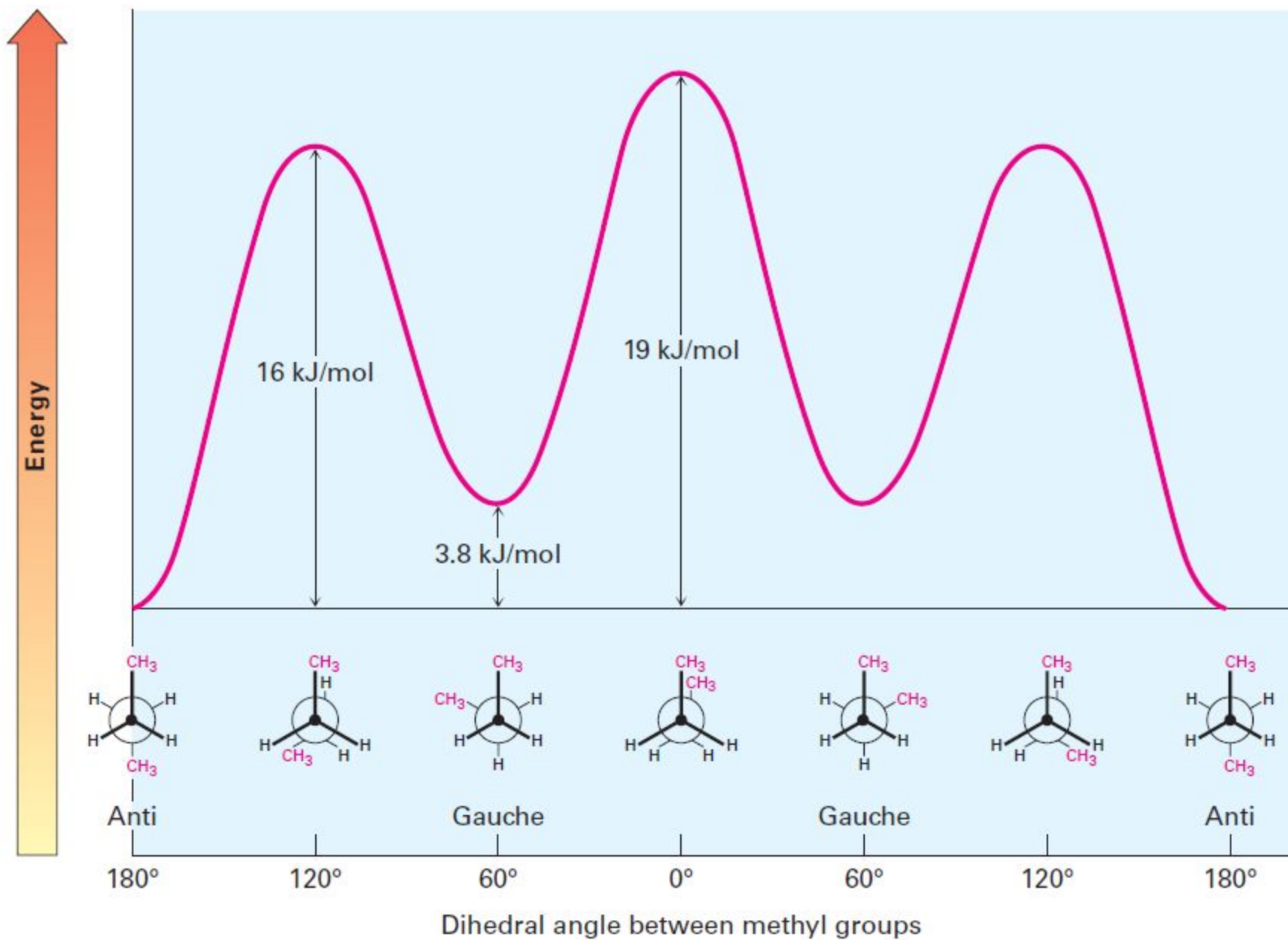


Table 3.5 Energy Costs for Interactions in Alkane Conformers

| Interaction | Cause | Energy cost | |
|--|-----------------------------|-------------|------------|
| | | (kJ/mol) | (kcal/mol) |
| H ↔ H eclipsed | Torsional strain | 4.0 | 1.0 |
| H ↔ CH ₃ eclipsed | Mostly torsional strain | 6.0 | 1.4 |
| CH ₃ ↔ CH ₃ eclipsed | Torsional and steric strain | 11 | 2.6 |
| CH ₃ ↔ CH ₃ gauche | Steric strain | 3.8 | 0.9 |

Sight along the C2–C3 bond of 2,3-dimethylbutane, and draw a Newman projection of the most stable conformation.

Draw a Newman projection along the C2–C3 bond of the following conformation of 2,3-dimethylbutane, and calculate a total strain energy:



Sight along the C2–C1 bond, 2-methylpropane (isobutane) and

(a) draw a Newman projection of the most stable conformation.

(b) draw a Newman projection of the least stable conformation.

(c) make a graph of energy versus angle of rotation around the C2–C1 bond.

(d) Since an H ↔ H eclipsing interaction costs 4.0 kJ/mol and an H ↔ CH₃ eclipsing interaction costs 6.0 kJ/mol, assign relative values to the maxima and minima in your graph.

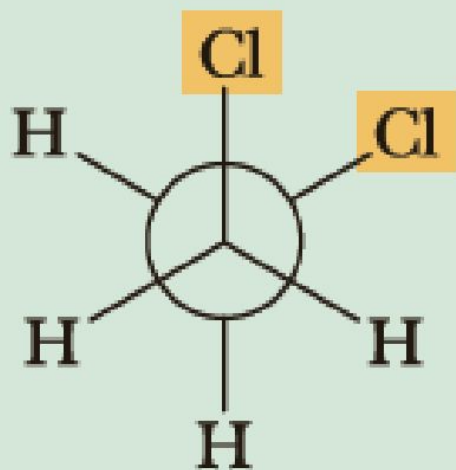
Consider 2-methylbutane (isopentane). Sighting along the C2–C3 bond:

(a) Draw a Newman projection of the most stable conformation.

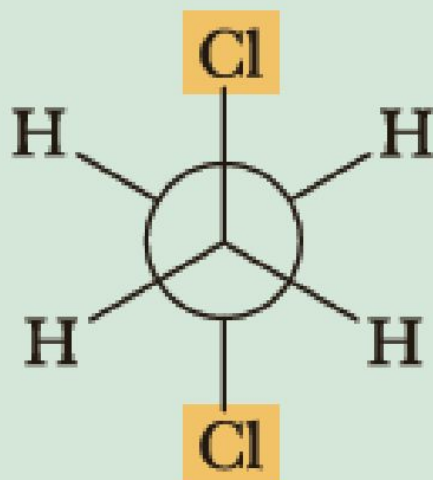
(b) Draw a Newman projection of the least stable conformation.

(c) If a CH₃ ↔ CH₃ eclipsing interaction costs 11 kJ/mol (2.5 kcal/mol) and a CH₃ ↔ CH₃ gauche interaction costs 3.8 kJ/mol (0.9 kcal/mol), make a quantitative plot of energy versus rotation about the C2–C3 bond.

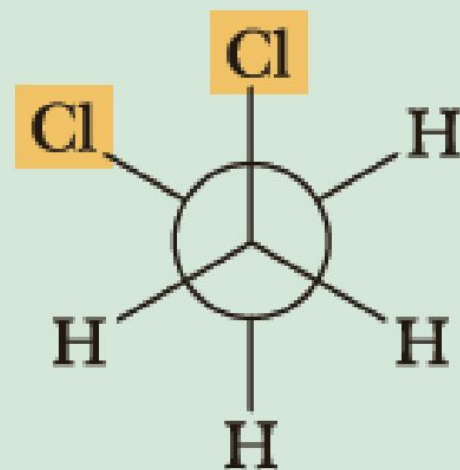
Construct a qualitative potential-energy diagram for rotation about the C–C bond of 1,2-dibromoethane. Which conformation would you expect to be most stable? Label the anti and gauche conformations of 1,2-dibromoethane.



Gauche
 $\theta = 60^\circ$



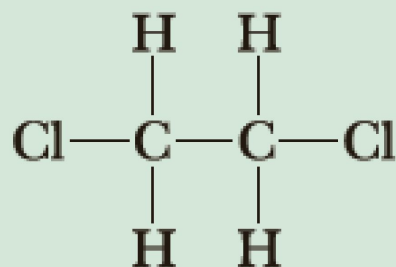
Anti
 $\theta = 180^\circ$



Gauche
 $\theta = 300^\circ$

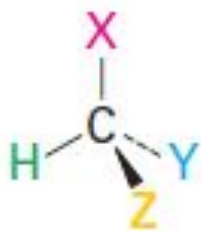
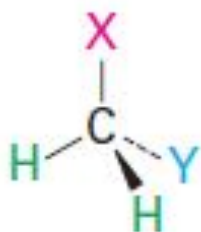
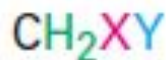
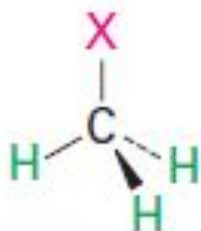
For 1,2-dichloroethane:

- (a) Draw Newman projections for all eclipsed conformations formed by rotation from 0° to 360° about the carbon-carbon single bond.
- (b) Which eclipsed conformation(s) has (have) the lowest energy? Which has (have) the highest energy?
- (c) Which, if any, of these eclipsed conformations are related by reflection?

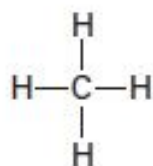


1,2-Dichloroethane

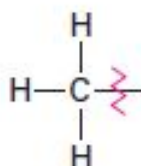
Какой простейший алкан будет
содержать энантиомер?



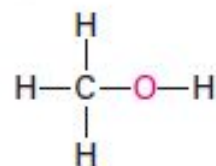
| Number of carbons (n) | Name | Formula (C_nH_{2n+2}) | Number of carbons (n) | Name | Formula (C_nH_{2n+2}) |
|---------------------------|---------|--------------------------------|---------------------------|-------------|---------------------------------|
| 1 | Methane | CH ₄ | 9 | Nonane | C ₉ H ₂₀ |
| 2 | Ethane | C ₂ H ₆ | 10 | Decane | C ₁₀ H ₂₂ |
| 3 | Propane | C ₃ H ₈ | 11 | Undecane | C ₁₁ H ₂₄ |
| 4 | Butane | C ₄ H ₁₀ | 12 | Dodecane | C ₁₂ H ₂₆ |
| 5 | Pentane | C ₅ H ₁₂ | 13 | Tridecane | C ₁₃ H ₂₈ |
| 6 | Hexane | C ₆ H ₁₄ | 20 | Icosane | C ₂₀ H ₄₂ |
| 7 | Heptane | C ₇ H ₁₆ | 30 | triacontane | C ₃₀ H ₆₂ |
| 8 | Octane | C ₈ H ₁₈ | | | |



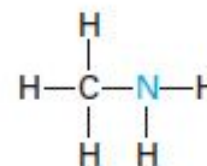
Methane



A methyl group



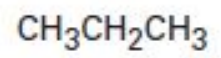
Methyl alcohol
(methanol)



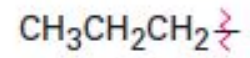
Methylamine

| Alkane | Name | Alkyl group | Name (abbreviation) |
|---|---------|--|---------------------|
| CH ₄ | Methane | -CH ₃ | Methyl (Me) |
| CH ₃ CH ₃ | Ethane | -CH ₂ CH ₃ | Ethyl (Et) |
| CH ₃ CH ₂ CH ₃ | Propane | -CH ₂ CH ₂ CH ₃ | Propyl (Pr) |
| CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₃ | Butane | -CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃ | Butyl (Bu) |
| CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃ | Pentane | -CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃ | Pentyl, or amyl |

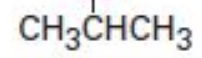
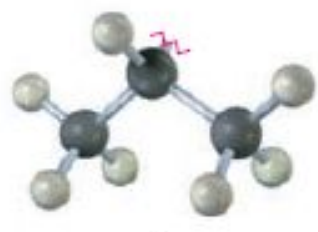
C₃



Propane

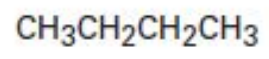


Propyl

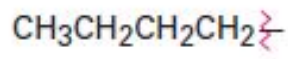


Isopropyl

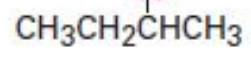
C₄



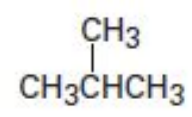
Butane



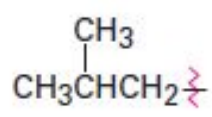
Butyl



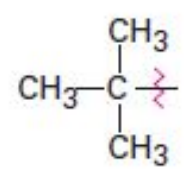
sec-Butyl



Isobutane



Isobutyl

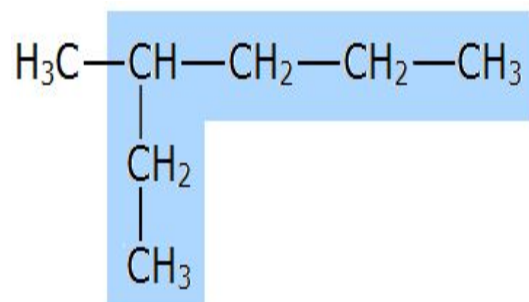


tert-Butyl

| Числовая приставка | Количество заместителей (радикалов), которые обозначает приставка |
|--------------------|--|
| Моно- | 1 |
| Ди- | 2 |
| Три- | 3 |
| Тетра- | 4 |
| Пента- | 5 |
| Гекса- | 6 |
| Гепта- | 7 |
| Окта- | 8 |
| Нона- | 9 |
| Дека- | 10 |
| Ундека-, гендека- | 11 |
| Додека- | 12 |

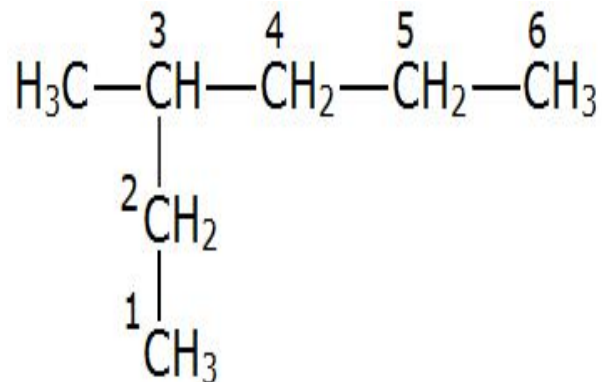
1. Для алканов неразветвленного (нормального) строения можно применять приставку **н-**: *н*-бутан, *н*-октан.

2. За основу названия соединения берут название углеводорода, которое соответствует числу углеродных атомов главной цепи. Главной цепью углеродных атомов считают: а) самую длинную; б) сложную (с наибольшим количеством разветвлений):

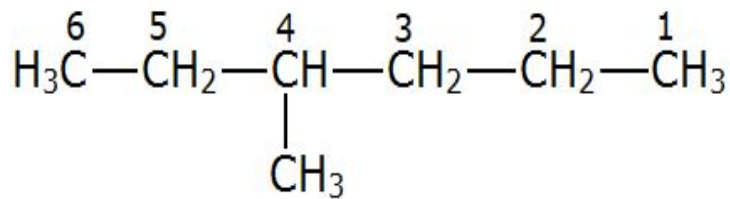
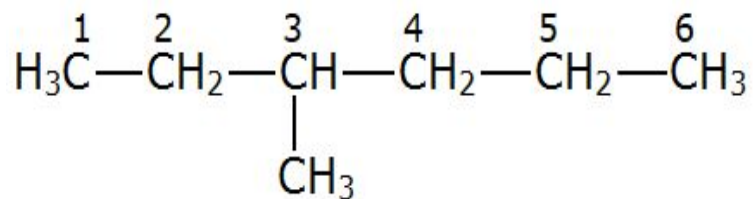


3. Разветвления, которые не вошли в состав главной цепи, называют алкильными заместителями или радикалами (здесь —CH₃). При наличии двух или нескольких цепей одинаковой длины за главную выбирают цепь с наибольшим количеством разветвлений.

4. После установления главной цепи атомы углерода нумеруют (указывают локанты):



а) нумерацию начинают с того конца, к которому ближе всего расположен любой алкильный заместитель (принцип наименьших локантов):



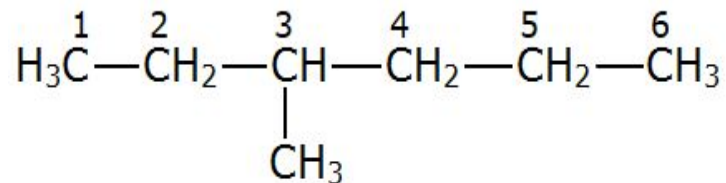
б) если алкильные группы размещены на одинаковом расстоянии от концов, то при выборе нумерации пользуются алфавитным порядком (метил → этил ...):

в) если на одинаковом расстоянии от концов размещены одинаковые алкильные группы, то нумерацию начинают с того конца, где есть больше разветвлений:

5. Название соединения составляют:

а) заместители, перечисленные в алфавитном порядке;

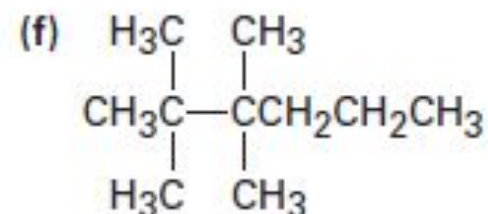
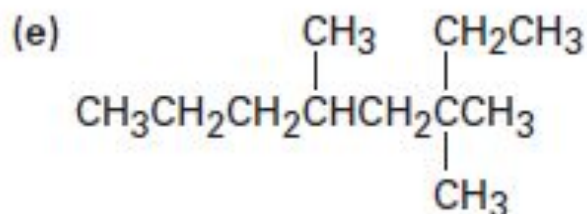
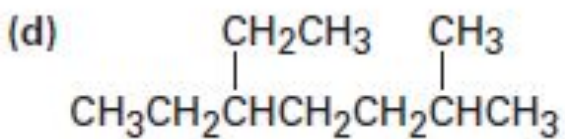
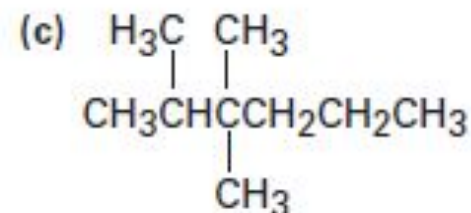
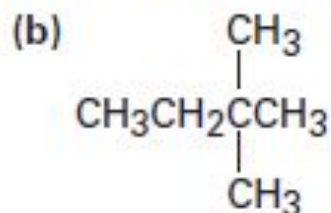
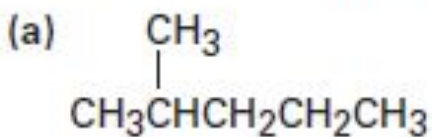
- перед названием заместителя указывают номер атома углерода, возле которого размещается алкил;
 - если необходимо указать несколько одинаковых заместителей, то используют числовые приставки: ди-, три-, тетра- (их учитывают в определении алфавитного порядка);
 - локанты одинаковых заместителей записывают в последовательности их числового увеличения и отделяют друг от друга запятыми; если две одинаковые алкильные группы размещены у атома углерода, то число повторяется дважды; локант от названия алкила (и наоборот) отделяют дефисом;
 - название последнего алкила пишут слитно с названием главной цепи;
- б) название алкана, которое соответствует главной углеродной цепи:

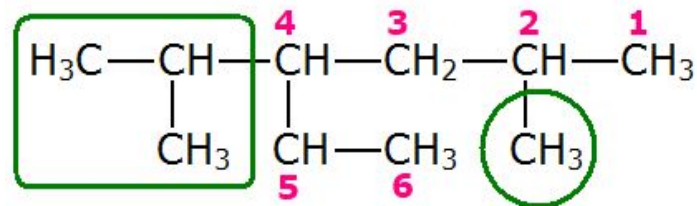
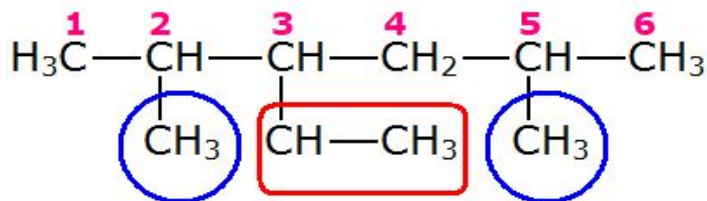
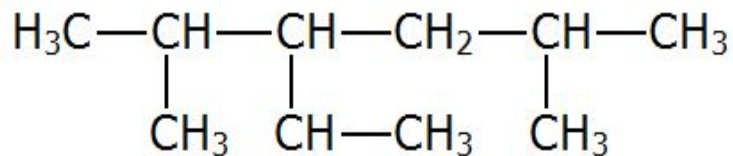


3-метилгексан

6. Приставки *изо-* и *нео-* учитывают при определении алфавитного порядка заместителей. Структурные приставки *втор-*, *трет-* не учитывают при определении алфавитного порядка заместителей.

Give IUPAC names for the following compounds:





В молекуле с тремя заместителями возможна и другая нумерация цепи (справа налево). Однако в этом случае сумма локантов будет равна $2+4 = 6$. В первом же случае (нумерация слева направо) сумма локантов $2+3 = 5$. Предпочтение отдается тому варианту нумерации, в котором сумма локантов минимальна. С учетом вышесказанного, название алкана:

2,5-диметил-3-этилгексан.

Таким образом, можно составить единый алгоритм составления названий алканов:

Локант – Заместитель – Название главной цепи – Суффикс

- а) 3,5-диметил-4,4-диэтилгептан;
- б) 3,6-диметил-4,5-диэтилоктан;
- в) 2,3,5-триметил-4-этилоктан;
- г) 2,2,6,8,8-пентаметил-4,4-диэтилнонан;
- д) 2,3,4-триметилпентан;
- е) 2,2,3-триметил-3-этилгексан;
- ж) 2,4,5-триметил-3-этилгептан;
- з) 2,5-диметил-4,5-диэтилоктан;
- и) 4-втор-бутил-2,2,6-триметил-5-этилоктан;
- к) 3,3,4,5-тетраметил-4-этилгептан.

В молекуле алкана имеются только первичные и вторичные атомы углерода. Вторичных атомов в два раза больше, чем первичных. Установите формулу алкана, назовите его по систематической номенклатуре IUPAC.

В молекуле алкана содержатся только первичные и третичные атомы углерода. Первичных атомов в два раза больше чем третичных. Установите формулу алкана, назовите его по систематической номенклатуре IUPAC.

Напишите формулу 2,4-диметил-3-этилгексана. Приведите формулу его гомолога, имеющего на один атом углерода больше и содержащего только первичные и четвертичные атомы углерода, назовите его по систематической номенклатуре IUPAC.