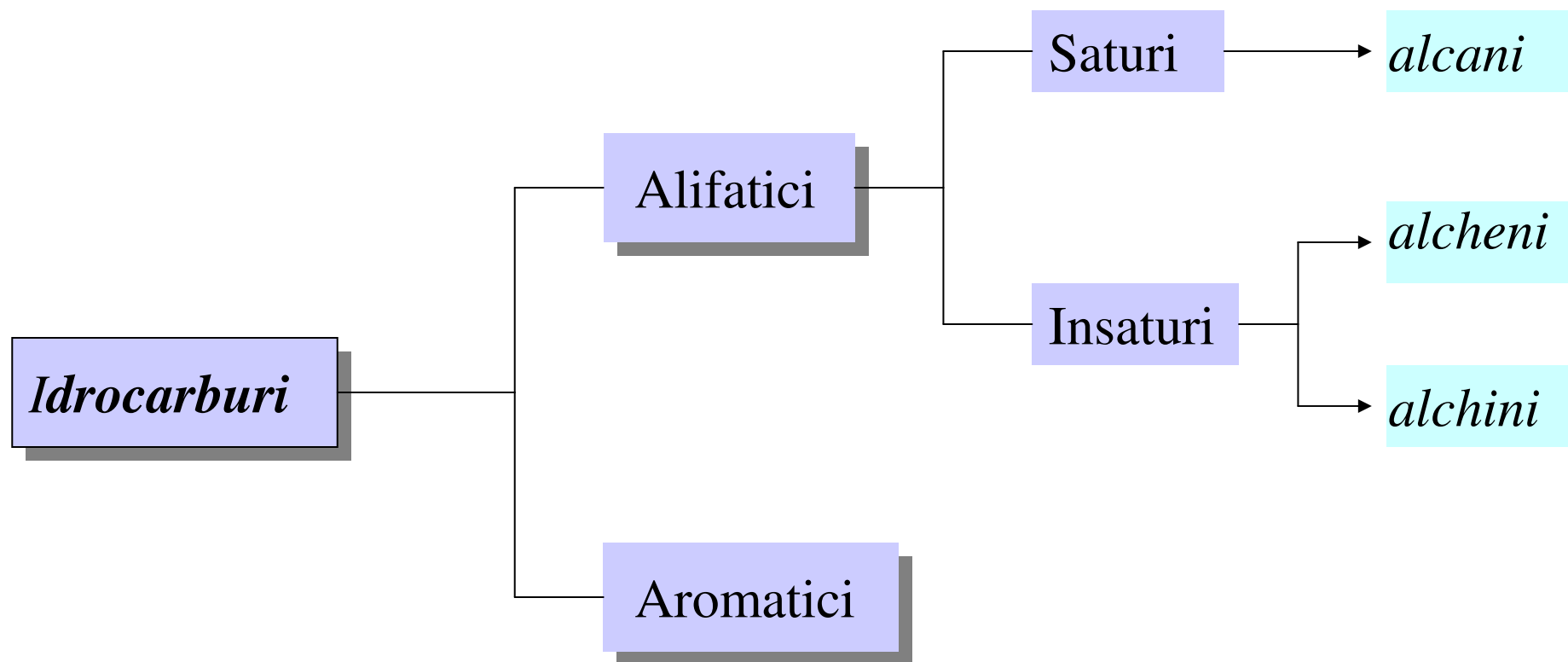


Idrocarburi

Sono i composti organici binari, costituiti solo da **Carbonio** e **Idrogeno**



Idrocarburi saturi: presentano esclusivamente legami singoli carbonio-carbonio

Idrocarburi insaturi: contengono almeno un legame multiplo carbonio-carbonio

Idrocarburi saturi: alcani

- Ogni atomo di carbonio ha ibridazione sp^3 ed è legato a 4 atomi mediante legami σ .
- La famiglia degli **alcani** costituisce **una serie omologa** cioè una serie di composti dove ogni membro differisce dal successivo di un termine costante CH_2 detto gruppo *metilene*

Formula generale degli alcani:

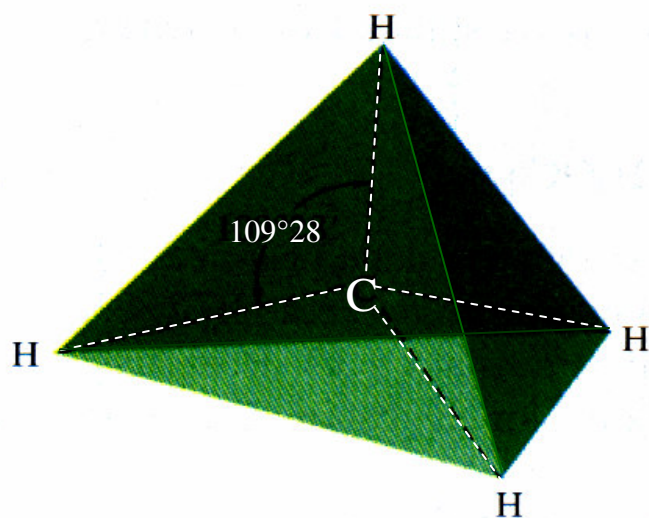
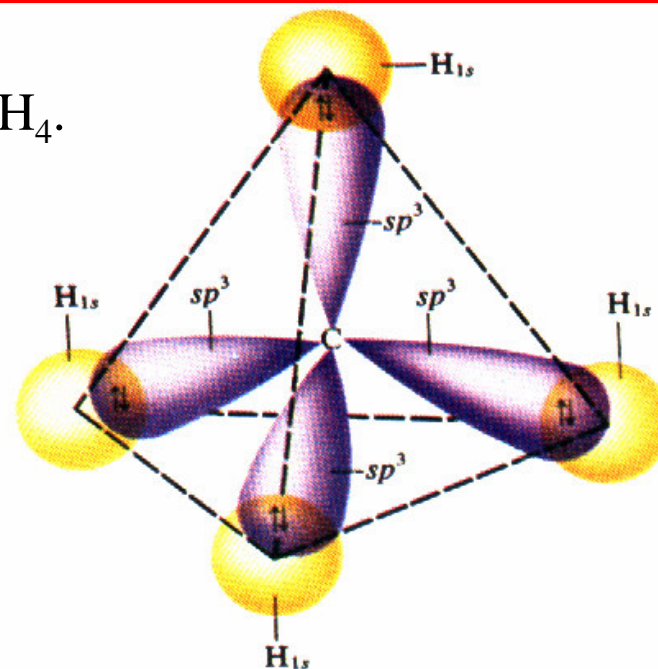


n=1	CH ₄	metano
n=2	C ₂ H ₆	etano
n=3	C ₃ H ₈	propano
n=4	C ₄ H ₁₀	butano

Alcani: struttura tetraedrica del carbonio

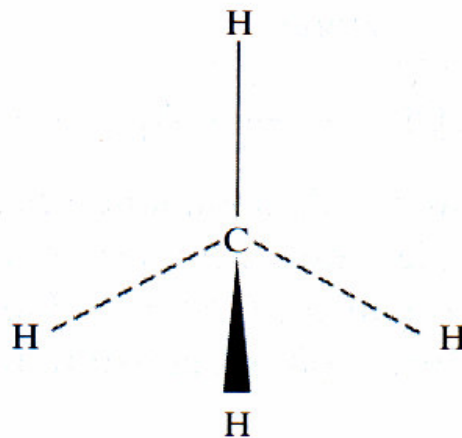
Rappresentazione tridimensionale della molecola di CH_4 .

Dalla teoria VSEPR è prevedibile che la geometria imposta dalle coppie elettroniche attorno all'atomo di carbonio centrale del CH_4 sia tetraedrica e può essere descritta in termini di un atomo di carbonio che lega quattro atomi di idrogeno con ibridazione sp^3 .



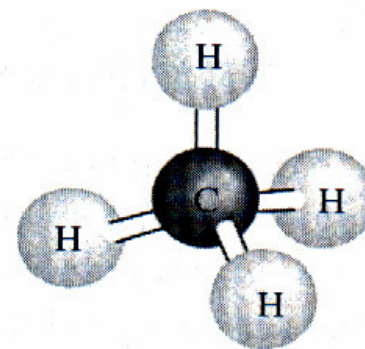
(a)

Struttura tetraedrica che mostra l'angolo di legame



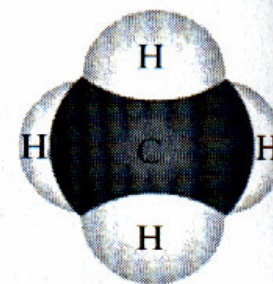
(b)

Modello per la rappresentazione "planare"



(c)

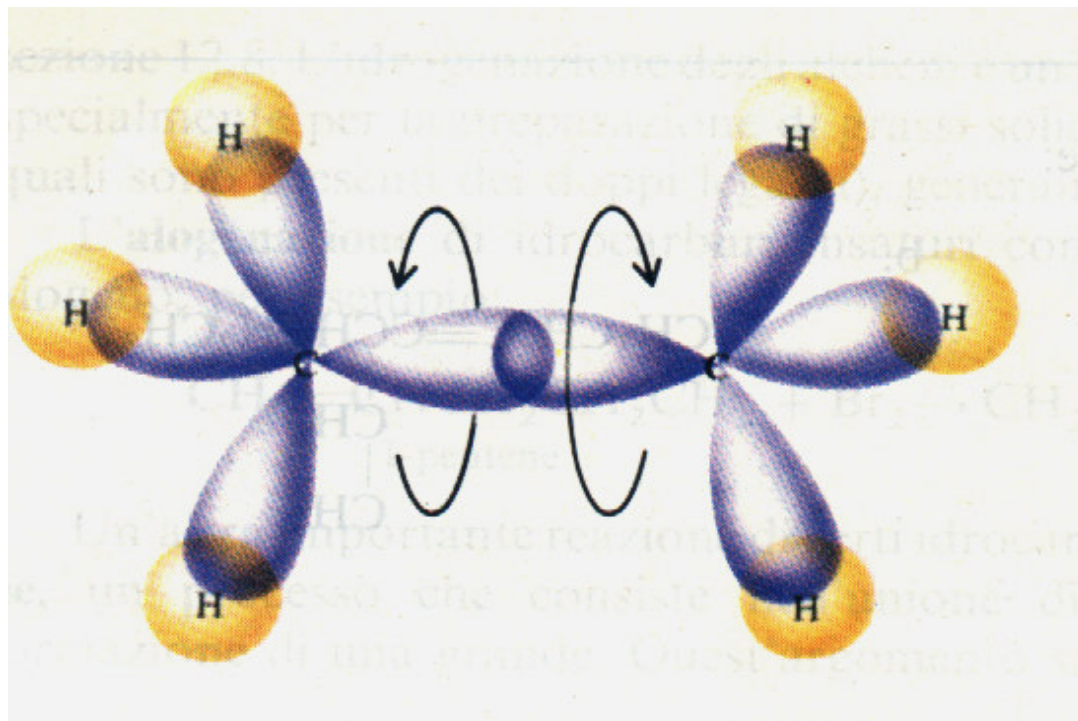
Modello "ball and stick"



(d)

Modello "space filling"

Alcani: rotazione intorno al legame σ



La rotazione lungo l'asse carbonio-carbonio non influenza la sovrapposizione dei due orbitali sp^3 che formano il legame carbonio-carbonio e quindi non modifica l'energia di legame. Per questo motivo la **rotazione** intorno all'asse C-C è **libera**.

Definizione di isomero

Si definiscono isomeri due o più molecole aventi **stessa formula molecolare** ma **differente formula di struttura**. Esistono vari tipi di isomeria:

Strutturale: gli atomi di carbonio sono legati tra di loro in maniera differente (per esempio isobutano e normalbutano).

Stereoisomeria: gli stereoisomeri presentano gli stessi legami ma differiscono per il modo in cui gli atomi sono **orientati nello spazio**. Per trasformare uno stereoisomero nell'altro è necessario rompere e riformare almeno un legame.

Si chiamano **isomeri geometrici** gli stereoisomeri che debbono la loro esistenza alla **manca di libera rotazione intorno ai doppi legami** (isomeria cis/trans nel 2-butene).

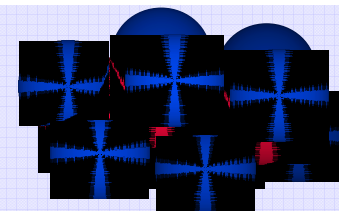
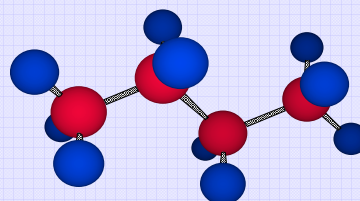
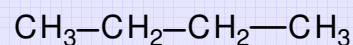
Alcani: isomeri di struttura

Per $n > 3$ esistono più *isomeri di struttura*. Le diverse strutture di queste molecole portano a differenti proprietà chimiche e fisiche

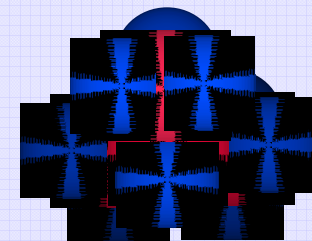
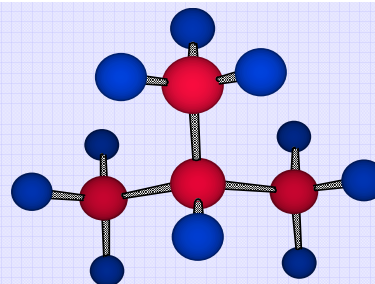
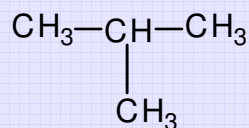
Modello ball and sticks

Modello space filling

n-butano



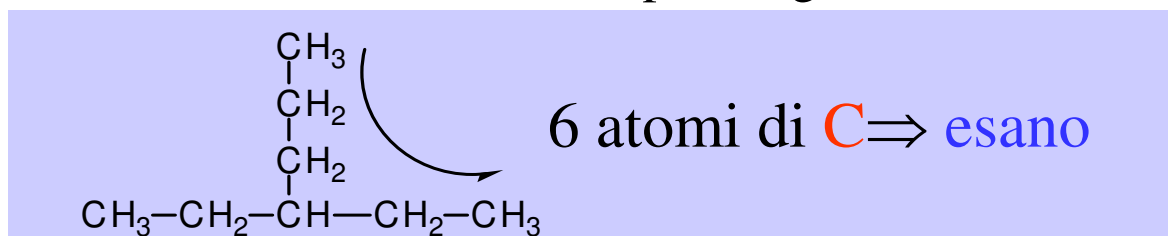
isobutano



Gli alcani a catena lineare sono chiamati *normali* (*n*-). Gli altri sono detti *ramificati*

Nomenclatura degli alcani

- Gli alcani con $n \leq 4$ hanno nomi tradizionali
- Per $n > 4$ il nome degli alcani si ottiene aggiungendo il suffisso - *ano* alla radice greca del numero di atomi di carbonio (*pent-* per cinque, *es-* per sei etc.). Per un idrocarburo ramificato la radice del nome è determinata dalla catena più lunga di atomi di carbonio

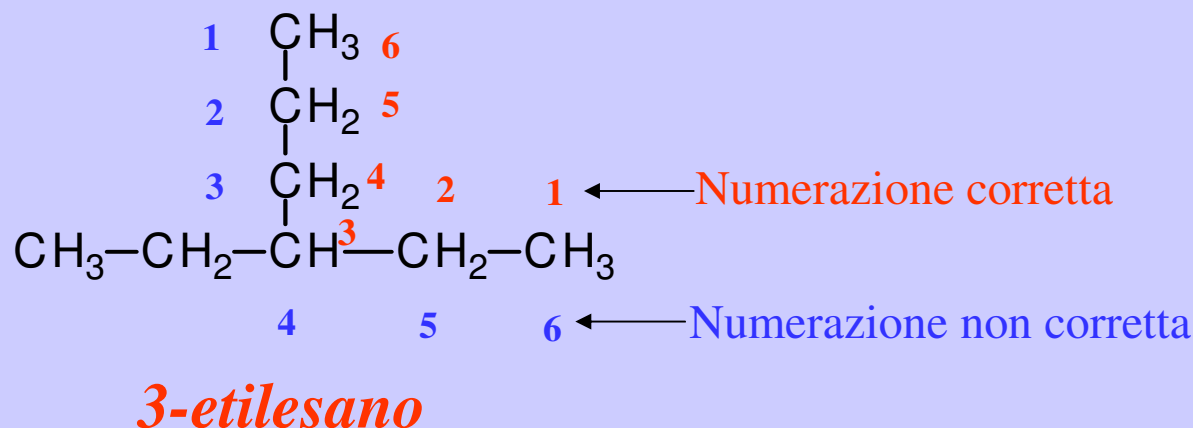


- Quando gli alcani fungono da sostituenti essi vengono denominati sostituendo il suffisso - *ano* con il suffisso -*il*. Sono chiamati *gruppi alchilici*.

—CH_3	metil
$\text{—CH}_2\text{—CH}_3$	etil
$\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$	propil
$\text{CH}_3\text{—CH—CH}_3$ $ $	isopropil

Nomenclatura degli alcani

- La posizione dei sostituenti è specificata numerando la catena più lunga in modo essi abbiano il numero più piccolo

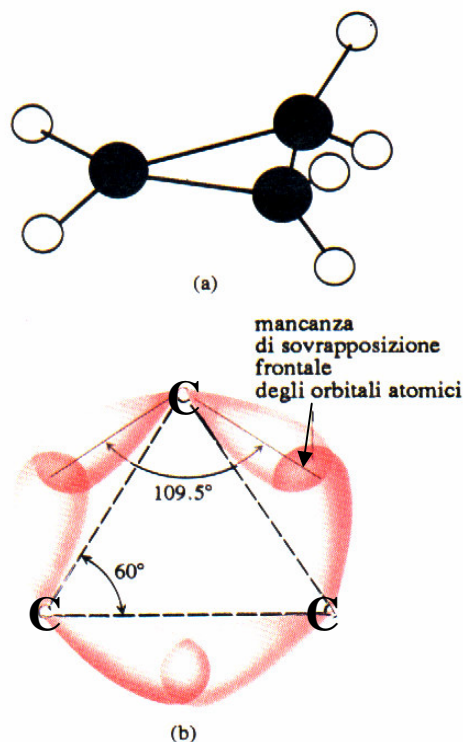


- Quando sono presenti diversi sostituenti vanno elencati in ordine alfabetico usando i prefissi di-, tri-, etc. per indicare la presenza di sostituenti uguali

Cicloalcani

Oltre a formare catene, gli atomi di C possono formare degli anelli. I cicloalcani sono anelli formati esclusivamente da gruppi CH_2

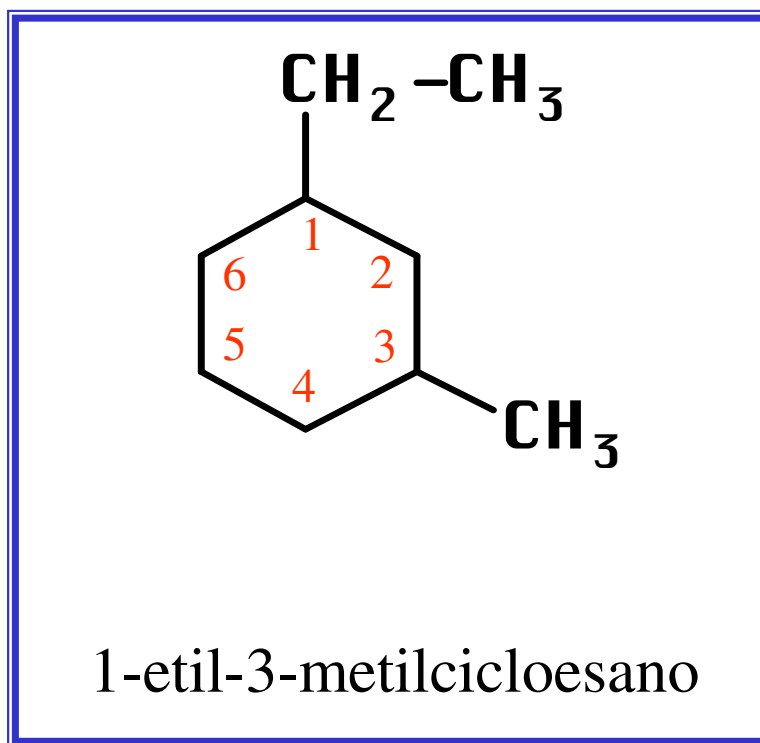
Formula generale dei cicloalcani:



Il più semplice è il **ciclopropano** C_3H_6 in cui gli atomi di C formano un triangolo equilatero con angoli di 60° ; gli orbitali ibridi sp^3 non si sovrappongono estesamente e ciò provoca un legame C-C debole ed in tensione e la molecola è molto più reattiva del propano. Analogamente si comporta il **ciclobutano** (angoli di 90°). Al contrario il **cicloepentano** e il **cicloesano** sono abbastanza stabili perché i loro anelli hanno angoli di legame più vicini all'angolo del tetraedro.

Cicloalcani: nomenclatura

La nomenclatura segue le stesse regole adottate per gli alcani. Si premette il prefisso *ciclo-* e l'anello viene numerato in modo da avere i numeri più bassi per i sostituenti.



Utilizzi degli alcani

Il petrolio deriva da processi di degradazione di organismi marini. All'attuale ritmo di consumo le riserve dureranno per altri 50 anni

Distillazione del petrolio greggio

RANGE DI EBOLLIZIONE, °C	COMPOSIZIONE	FRAZIONE	USI
minore di 0	C ₁ -C ₄	gas	combustibili gassosi
0-50	C ₅ -C ₇	etere di petrolio	solventi
50-100	C ₆ -C ₈	ligroina	solventi
70-150	C ₆ -C ₉	benzina	carburante
150-300	C ₁₀ -C ₁₆	kerosene	combustibile per jet e motori diesel
più di 300	C ₁₆ -C ₁₈	gasolio	combustibile per motori diesel, materia prima per cracking
—	C ₁₈ -C ₂₀	cere	olio lubrificante, olio minerale, materia prima per cracking
—	C ₂₁ -C ₄₀	cere paraffiniche	candele, carta cerata
—	più di 40	residuo	catrame per coperture, materiali stradali, impermeabilizzanti

Quasi nulli gli insaturi, Presenza di zolfo

I combustibili per autotrasporti

Metano: CH_4 . Emette minori quantità di CO e NOx ed inoltre non contenendo aromatici non provoca il rilascio di sostanze cancerogene. Emette meno CO_2 ed ha elevato numero di ottani e quindi consente rapporti di compressione elevati. Il problema maggiore è connesso con lo stoccaggio del gas che deve essere ad elevata pressione (200 atm) in bombole. Inoltre dà meno potenza al motore e una accelerazione più lenta.

GPL: C3-C5. gas di petrolio liquefatto. Principalmente miscela di propano e butano. Viene conservato allo stato liquido sotto leggera pressione. Emette meno CO, NOx e CH che benzina. Ha densità maggiore dell'aria per cui non può essere utilizzato in vetture poste in rimesse chiuse interrate. Costa meno di gasolio e benzina. E' meno inquinante. Emette meno CO_2 . Garantisce potenze ed accelerazioni simili alla benzina. Potenzialmente pericoloso in caso di incidente.

Benzina: C5-C12. Possono contenere quantità diverse di idrocarburi aromatici o alifatici a seconda del numero di ottani e della presenza o no di antidetonanti. Vengono additivate di antidetonanti, antiossidanti, antiruggine, antighiaccio e coloranti (per motivi fiscali). Temperatura di infiammabilità 20°C .

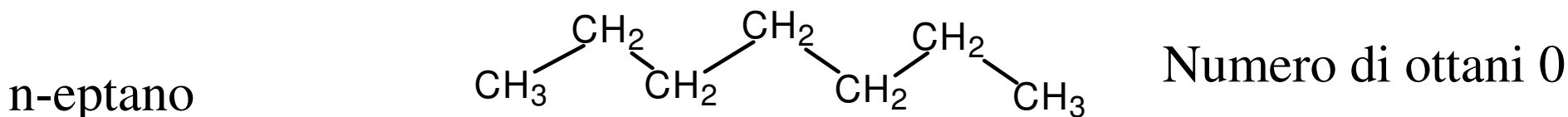
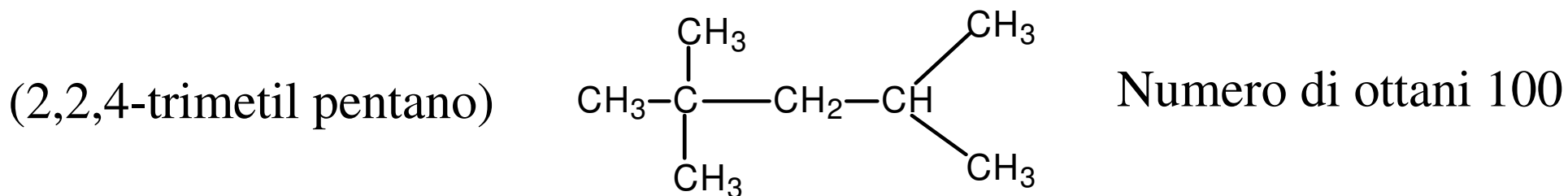
Diesel: Condensa tra 220 e 330°C . C14-C18. Si aggiungono additivi per avere buona fluidità a basse T (diesel artico). Miglior rendimento rispetto motori a benzina di conseguenza minor quantità di CO_2 prodotta. Hanno punto di infiammabilità superiore a T ambiente per cui vanno preriscaldati (candelette). Rilasciano più particolato carbonioso della benzina. Contengono più zolfo di benzina.

Il numero di ottani e il potere antidetonante delle benzine

La corretta combustione in un motore a scoppio si verifica quando la scintilla prodotta dalla candela innesca la reazione tra vapori di benzina e aria originando un fronte di combustione che si propaga gradualmente nella camera di combustione con un aumento di pressione che spinge i pistoni. Talvolta l'aumento di T e di P provoca l'autoaccensione di tutta la miscela ancora presente che reagisce istantaneamente con una velocità di propagazione estremamente elevata. Si ha una detonazione (battito in testa) con uno spreco di energia e danni a valvole pistoni e candele. La tendenza alla detonazione aumenta con il rapporto di compressione. Di conseguenza è necessario ridurre la detonazione tramite la scelta di una opportuna miscela di idrocarburi (rapporto alifatici/aromatici e ramificati/lineari) o l'aggiunta di additivi

Il numero di ottani

L'isottano (2,2,4-trimetil pentano) ha bassissima tendenza a dare detonazione mentre il n-eptano da facilmente detonazione.



All'aumentare del numero di atomi di C diminuisce N.O.

A parità di numero atomi di C il N.O. aumenta con la ramificazione

Gli idrocarburi aromatici hanno N.O. più elevato degli alifatici

Il numero di ottani

Per aumentare numero di ottani

- Aumento della frazione di ramificati con cracking catalitico e reforming catalitico
- Aumento della frazione aromatica tramite reforming catalitico (la benzina verde contiene dal 30 al 40% di aromatici!)
- Addizione di antidetonanti come composti ossigenati e ramificati piombo tetraetile (benzina rossa) o MTBE (benzina verde)

Nei motori Diesel si parla di numero di Cetano (normal esadecano $C_{16}H_{34}$) per definire l'accendibilità (minore o maggior ritardo nella combustione). Numero di Cetano ottimale intorno a 50.

Idrocarburi insaturi: alcheni

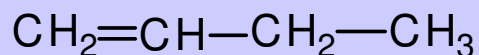
Gli alcheni sono idrocarburi con un legame doppio C=C dovuto all'ibridazione sp^2 .

Formula generale degli alcheni:

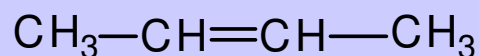


La nomenclatura è simile a quella degli alcani:

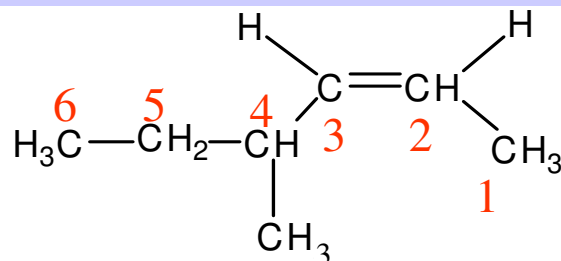
- Il nome di base dell'idrocarburo finisce in -ene
- Il doppio legame è indicato dall'atomo di Carbonio a numerazione più bassa



1-butene



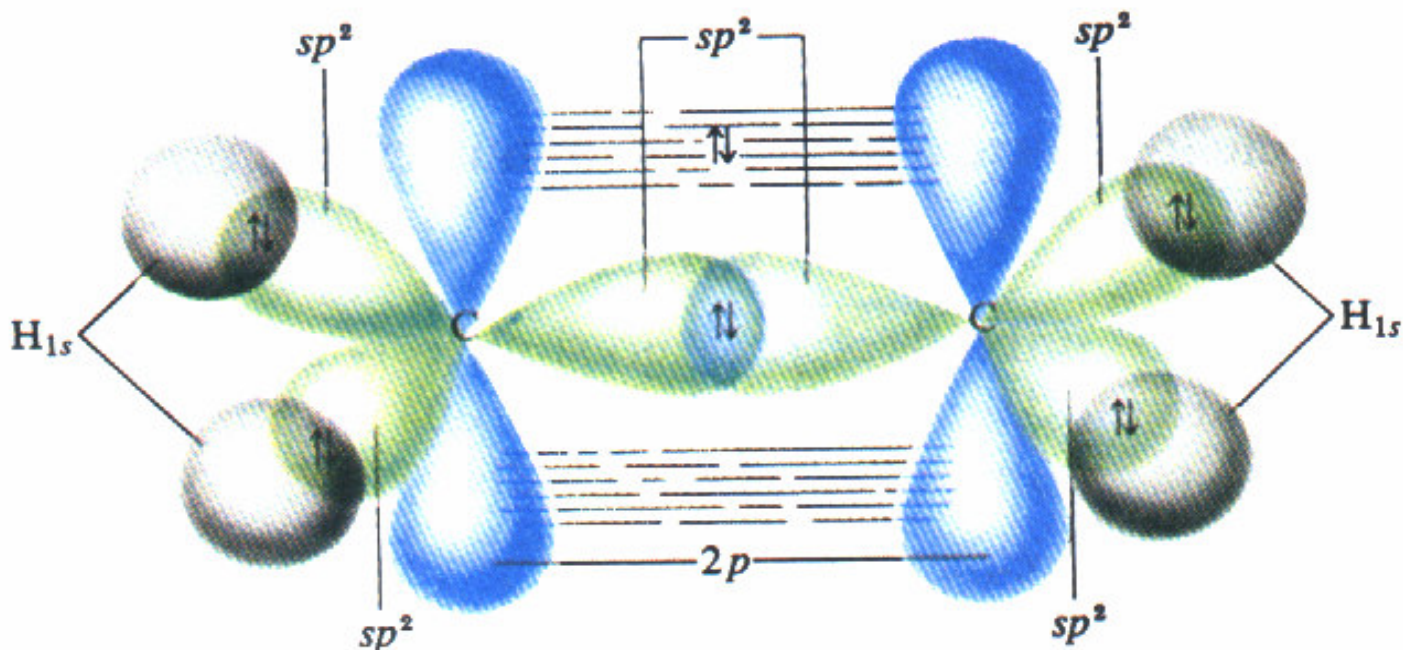
2-butene



4-metil-*cis*-2-esene

Idrocarburi insaturi: alcheni

Orbitali molecolari dell'etilene

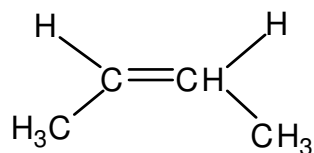


Negli alcheni i carboni dei doppi legami presentano ibridazione sp^2 . Il legame σ C-C è formato per accoppiamento di due elettroni presenti negli orbitali sp^2 e il legame π per accoppiamento di elettroni p .

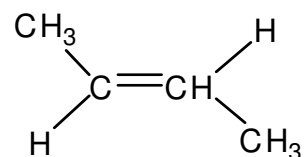
I due orbitali p sui due atomi di carbonio dell'etilene devono essere allineati (paralleli) per poter formare legami π . Questo *impedisce la rotazione* dei due gruppi CH_2 l'uno rispetto all'altro a temperatura ordinaria, contrariamente agli alcani per i quali è possibile la libera rotazione.

Alcheni: isomeria cis/trans

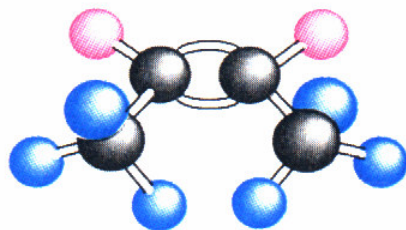
Attorno agli atomi di C uniti mediante il doppio legame la *rotazione è impedita*. Ciò comporta il manifestarsi dell'*isomeria geometrica*. Ad esempio il 2-butene esiste in due isomeri geometrici.



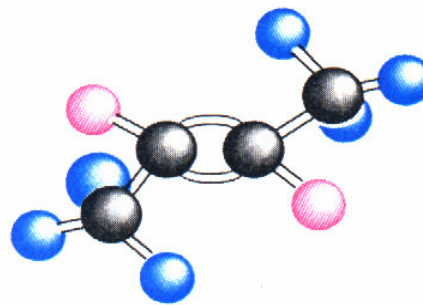
Cis 2-butene



Trans 2-butene

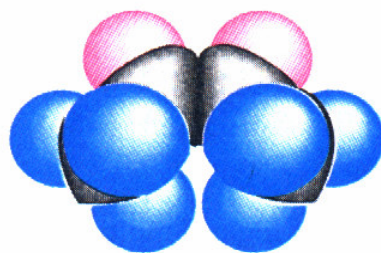


cis

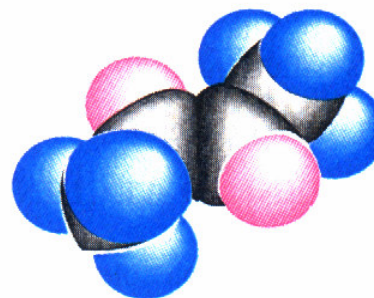


trans

(a)



cis



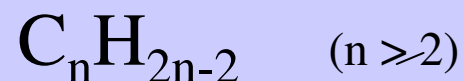
trans

(b)

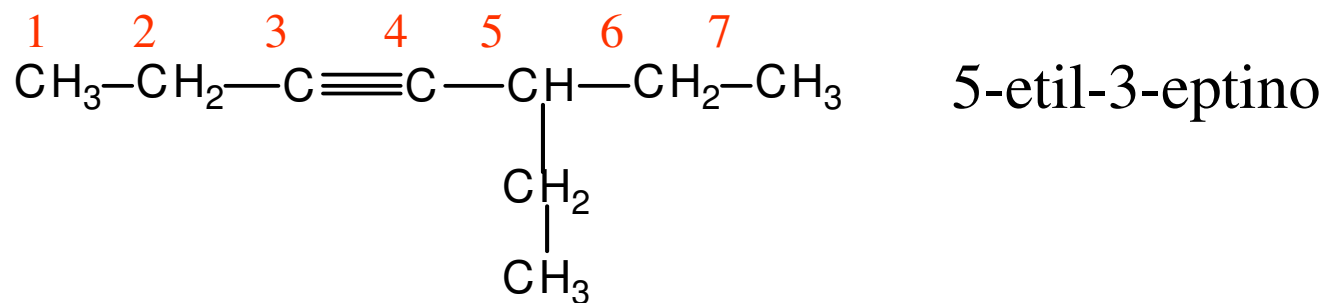
Idrocarburi insaturi: alchini

Gli alchini sono idrocarburi con un legame triplo carbonio carbonio dovuto all'ibridazione sp .

Formula generale degli alchini:



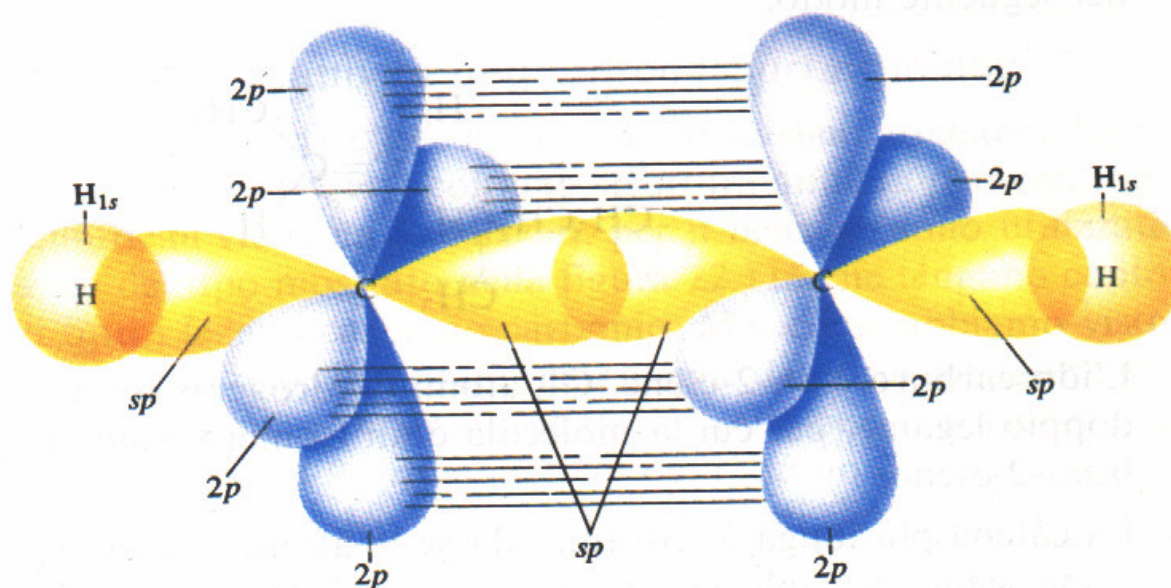
La nomenclatura fa uso del suffisso **-ino** ed è analoga a quella degli alcheni



Anche gli idrocarburi insaturi possono esistere in strutture cicliche

Idrocarburi insaturi: alchini

Orbitali molecolari dell'acetilene



Negli alchini i carboni del triplo legame presentano ibridazione sp . Il legame σ C-C è formato per accoppiamento di due elettroni presenti negli orbitali sp e i 2 legami π per accoppiamento di due coppie di elettroni p .

Analogamente agli alcheni, anche per gli alchini la rotazione intorno all'asse C-C è impedita a temperatura ordinaria.

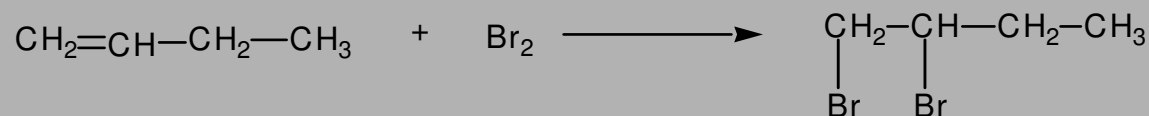
Reazioni di alcheni e alchini

Le principali reazioni sono reazioni di **addizione** con rottura di legami π che sono più deboli dei legami σ . Le più importanti sono:

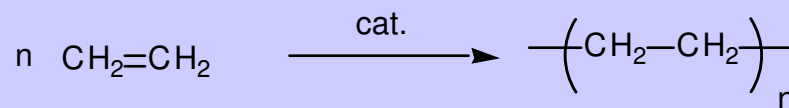
Reazioni di idrogenazione



Reazioni di alogenazione

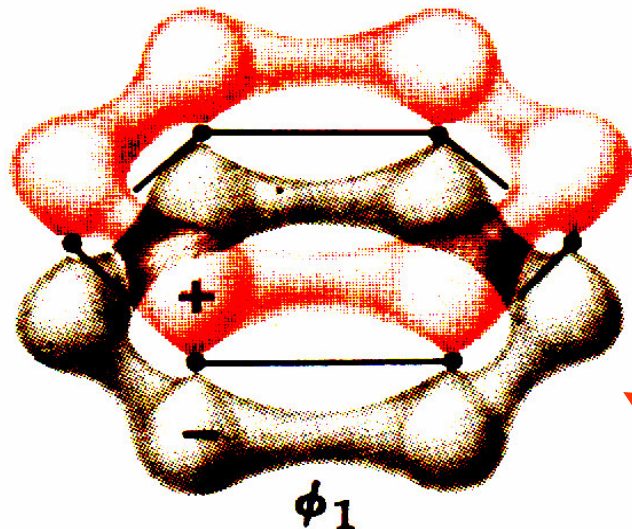


Un'altra importante reazione degli idrocarburi insaturi è la reazione di **polimerizzazione**. Tra gli esempi più importanti di polimeri ottenibili da idrocarburi insaturi ci sono il polietilene, il polipropilene, il polibutadiene e il polistirene.



Idrocarburi aromatici

Orbitali molecolari del benzene



Primo orbitale π del benzene

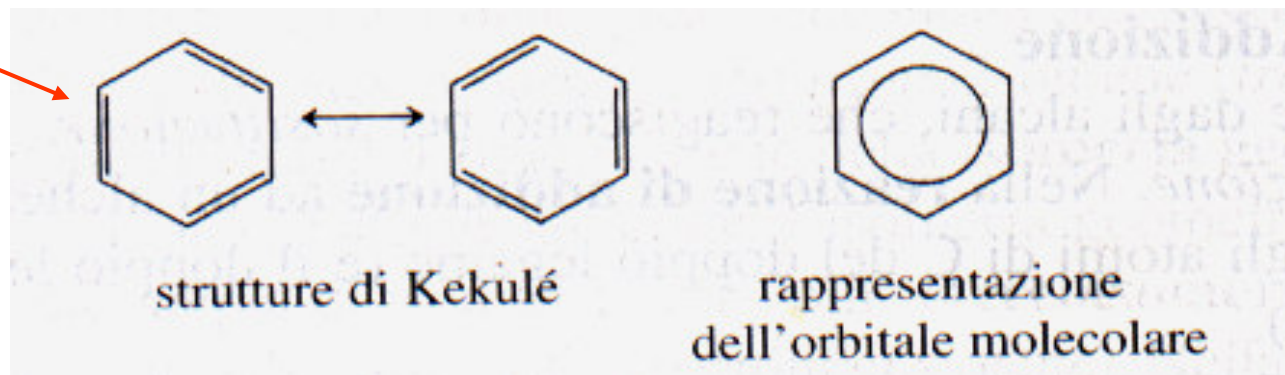
Regola di Huckel

i composti aromatici devono avere

$$4n + 2 \text{ elettroni } \pi$$

Gli elettroni π sono delocalizzati su tutto l'anello

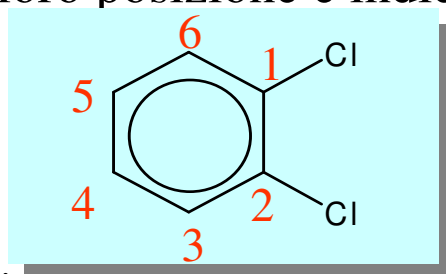
Formule di risonanza: si ha risonanza quando una molecola può essere rappresentata da due o più strutture ad energia simile che si differenziano solo per la disposizione degli elettroni



Idrocarburi aromatici: nomenclatura

La nomenclatura dei derivati del benzene è simile a quella usata per i sistemi ciclici saturi.

In presenza di più sostituenti la loro posizione è indicata con i numeri



1,2-diclorobenzene

Si possono anche usare i prefissi

orto- (*o-*)

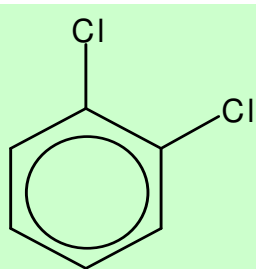
sostituenti adiacenti

meta- (*m-*)

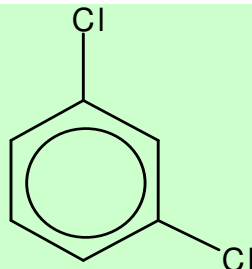
sostituenti distanziati da un atomo di C

para- (*p-*)

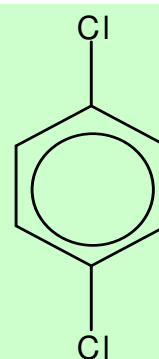
sostituenti contrapposti



o-diclorobenzene



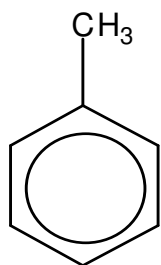
m-diclorobenzene



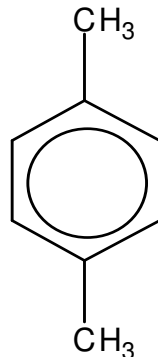
p-diclorobenzene

Idrocarburi aromatici: nomenclatura

Alcuni derivati del benzene hanno nomi tradizionali. Tra questi i più importanti sono:

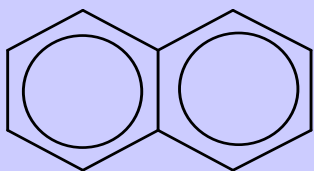


metilbenzene
(toluene)

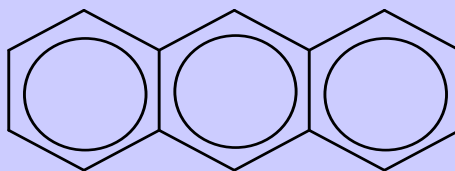


1,4-dimetilbenzene
(*para*-xilene)

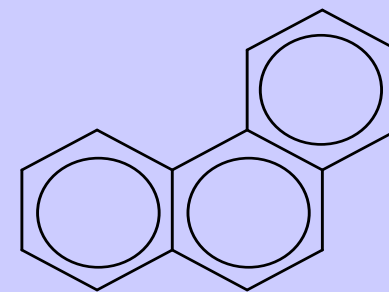
Il benzene è la molecola aromatica più semplice; sistemi più complessi possono essere visti come degli anelli benzenici “fusi”. Queste molecole sono dette composti aromatici ad anelli condensati



naftalene

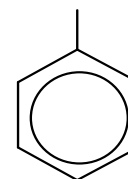


antracene



fenantrene

Quando il benzene funge da sostituito è detto gruppo *fenile*.



Derivati degli idrocarburi

Gruppi funzionali

La maggior parte delle molecole organiche contiene altri elementi oltre a C e H. L'introduzione di un atomo di un elemento diverso come l'ossigeno e l'azoto (detti *eteroatomi*) o di un gruppo di atomi nella struttura degli idrocarburi porta a notevoli mutamenti della loro reattività e delle proprietà fisiche.

Gli atomi di elementi diversi o i gruppi di atomi sono detti *gruppi funzionali*. Si può effettuare una classificazione dei composti organici sulla base dei gruppi funzionali che la compongono.

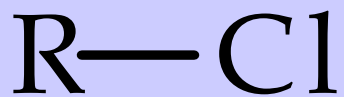
Sono infatti i gruppi funzionali che determinano in maniera preponderante le proprietà chimiche e fisiche della molecola

Gruppi funzionali

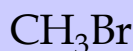
TIPO DI COMPOSTO	FORMULA DI STRUTTURA GENERALE	ESEMPIO	NOME
alcano	$R-H$	$CH_3CH_2CH_2CH_2CH_3$	pentano
alchene	$\begin{array}{c} R & & R \\ & \diagdown & / \\ & C=C & \\ & / & \diagdown \\ R & & R \end{array}$	$CH_3CH_2CH_2CH=CH_2$	1-pentene
alchino	$R-C \equiv C-R$	$CH_3CH_2C \equiv CCH_3$	2-pentino
alcool	$R-OH$	$CH_3CH_2CH_2CH_2CH_2OH$	1-pentanol
alogenuro	$R-X$	$CH_3CH_2CH(Br)CH_2CH_3$	3-bromopentano
nitro	$R-NO_2$	$CH_3CH_2CH_2CH_2CH_2NO_2$	1-nitropentano
etere	$R-O-R$	$CH_3CH_2OCH_2CH_2CH_3$	etil propil etere
aldeide	$\begin{array}{c} O \\ \\ R-C-H \end{array}$	$CH_3CH_2CH_2CH_2CHO$	pentanale
chetone	$\begin{array}{c} O \\ \\ R-C-R \end{array}$	$CH_3CH_2COCH_2CH_3$	3-pentanone
acido carbossilico	$\begin{array}{c} O \\ \\ R-C-OH \end{array}$	$CH_3CH_2CH_2CH_2COOH$	acido pentanoico
estere	$\begin{array}{c} O \\ \\ R-C-O-R \end{array}$	$CH_3CH_2CH_2CH_2COCH_3$	metil pentanoato
ammina	$R-NH_2$	$CH_3CH_2CH_2CH_2CH_2NH_2$	pentilammina

Gruppi funzionali: alogenuri

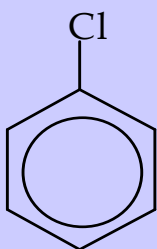
Formula generale degli alogenuri



Sono divisi in alogenuri alchilici e alogenuri arilici a seconda che il gruppo R sia alifatico o aromatico



Bromometano (bromuro di metile)

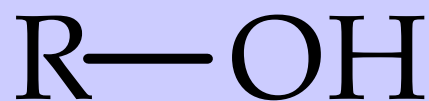


Clorobenzene

Utilizzi e tossicità: gli alogenuri alchilici sono principalmente utilizzati come solventi per reazioni su scala industriale (per esempio il cloruro di metilene è utilizzato per la polimerizzazione per via interfacciale del policarbonato del bisfenolo A). Gli alogenuri sono particolarmente tossici e cancerogeni (maggiore è il numero di alogeni per molecole, maggiore è la tossicità)

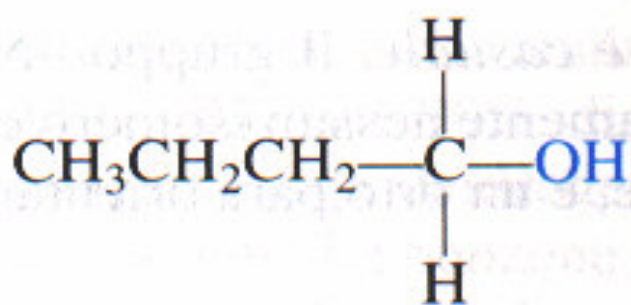
Gruppi funzionali: alcoli

Sono caratterizzati dalla presenza del gruppo ossidrilico:

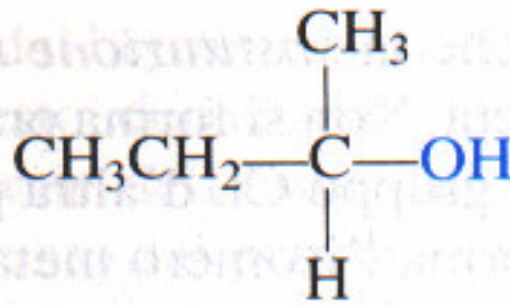


Il nome sistematico si ottiene sostituendo la -o terminale dell'idrocarburo con il suffisso **-olo**. La posizione dell'OH è specificata da un numero (quando necessario) il più piccolo tra i numeri che indicano i sostituenti.

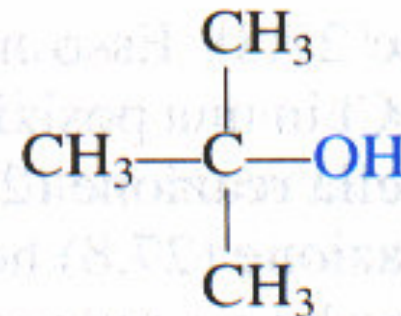
Gli alcoli sono classificati a seconda del numero di gruppi R legati al C che porta il gruppo -OH:



1-butanolo
(alcool butilico)
(un alcool *primario*)



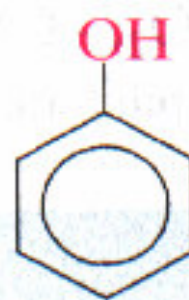
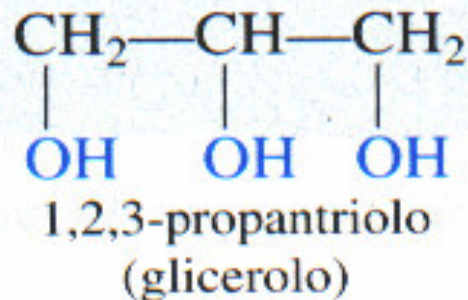
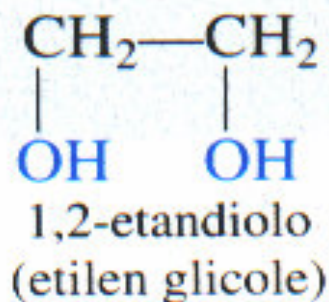
2-butanolo
(alcool *s*-butilico)
(un alcool *secondario*)



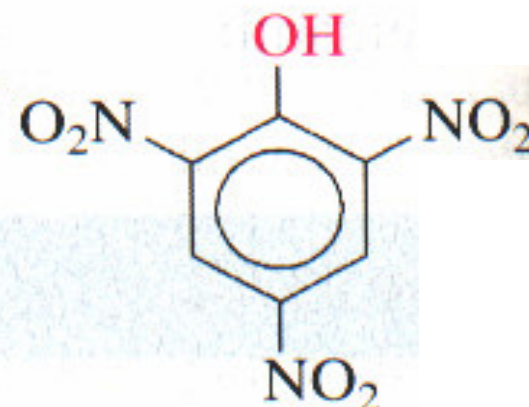
2-metil-2-propanolo
(alcool *t*-butilico)
(un alcool *terziario*)

Gruppi funzionali: alcoli

Esistono anche molecole con più gruppi ossidrilici chiamati alcoli poliossidrilici tra i quali il più importante è l'1,2-etandiolo (glicole etilenico)



fenolo
(acido carbolico)



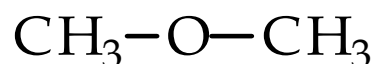
2,4,6-trinitrofenolo
(acido picrico)

L'alcol aromatico più semplice ed utilizzato è il fenolo (idrossibenzene) impiegato specialmente nella produzione di materiali polimerici (adesivi e materiali plastici).

Gruppi funzionali: eteri



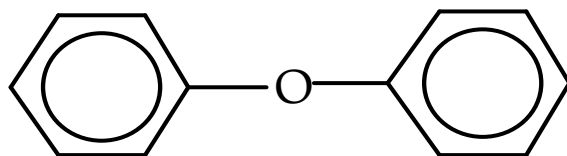
Gli eteri vengono denominati premettendo i nomi dei gruppi alchilici attaccati all'atomo di ossigeno e aggiungendo la parola *etere*.



Dimetiletere (etere metilico)



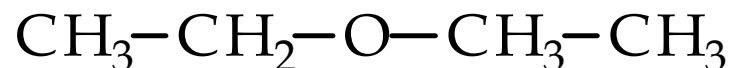
Etil metiletere



Difeniletere

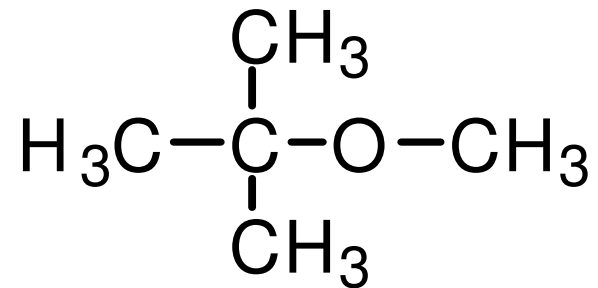
Gli eteri sono composti poco reattivi e per questo vengono spesso utilizzati come solventi per reazioni.

Il composto più importante è *l'etere etilico* che è anche usato come anestetico



Dietiletere (etere etilico)

MTBE

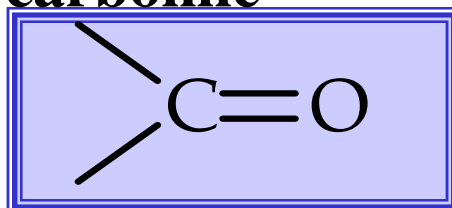


Metil-terbutiletere

Antidetonante utilizzato nelle benzine verdi in sostituzione del piombo tetraetile che provoca la disattivazione del catalizzatore

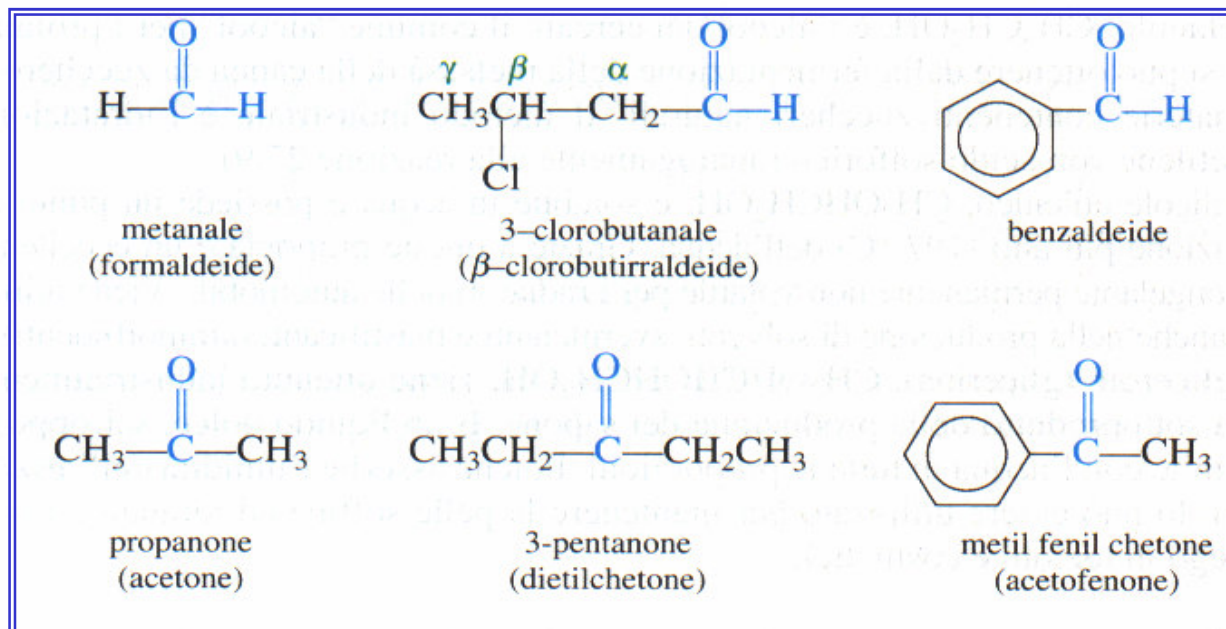
Gruppi funzionali: aldeidi e chetoni

Contengono il gruppo **carbonile**



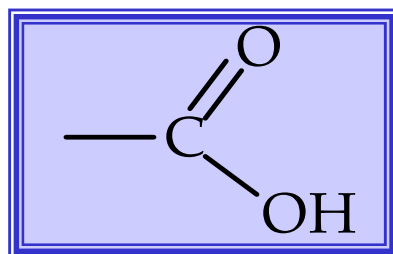
I chetoni presentano un gruppo carbonile legato a due atomi di carbonio, mentre nelle aldeidi il carbonile è legato ad almeno un atomo di H.

Il nome sistematico per un aldeide si ottiene per rimozione della -o finale del corrispondente alcano ed aggiunta del suffisso **-ale**. Per i chetoni si usa il suffisso **-one** ed un numero che indica la posizione del gruppo carbonile



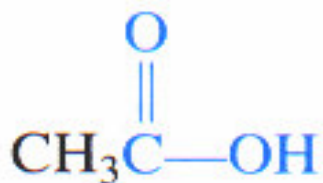
Gruppi funzionali: acidi carbossilici ed esteri

Gli acidi contengono il gruppo *carbossile*

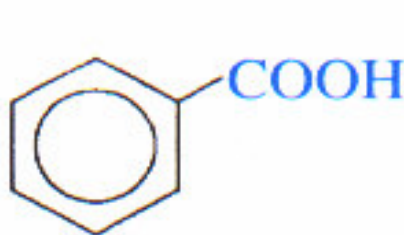


In genere questi composti sono acidi deboli in soluzione acquosa.

La nomenclatura degli acidi carbossilici prevede la sostituzione della **-o** finale del corrispondente alcano con il suffisso **-oico**:



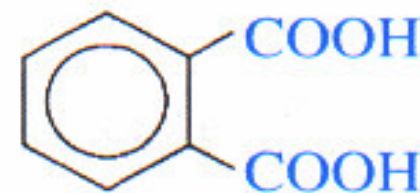
acido acetico
(un acido alifatico)
Acido etanoico



acido benzoico
(un acido aromatico)



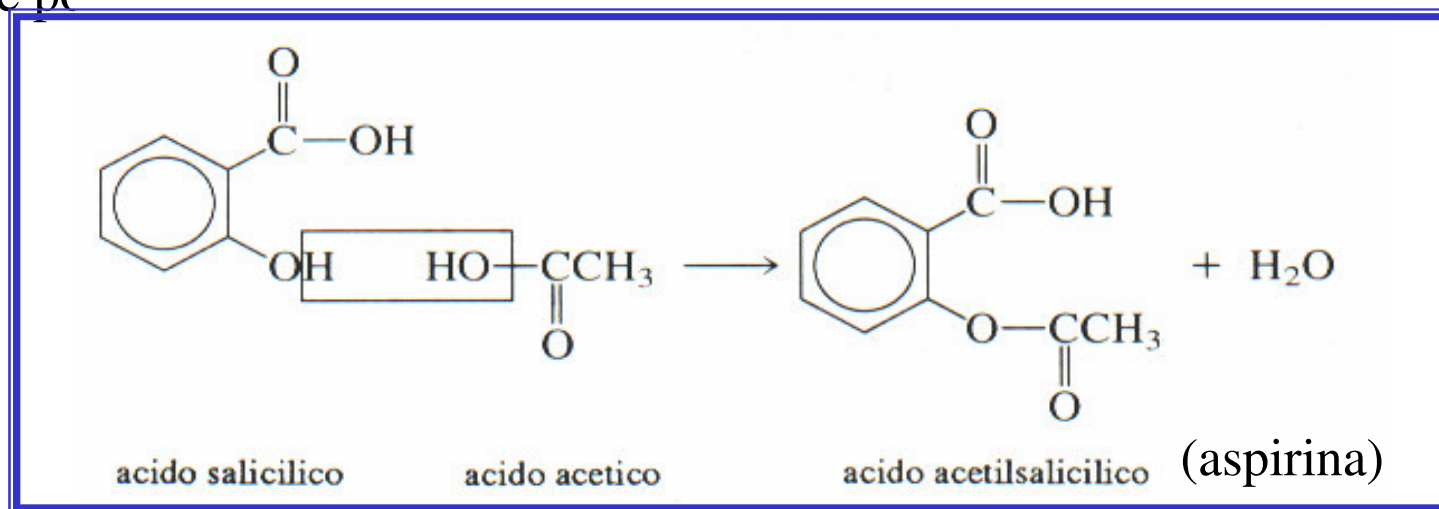
acido ossalico
(un acido dicarbossilico
alifatico)



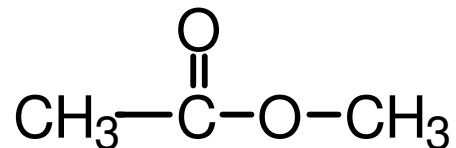
acido ftalico
(un acido dicarbossilico
aromatico)

Gruppi funzionali: acidi carbossilici ed esteri

La reazione più importante degli acidi carbossilici è la reazione di **esterificazione diretta** con un alcol che porta alla formazione del corrispondente estere



La nomenclatura degli esteri prevede la sostituzione del suffisso **-oico** dell'acido di partenza con il suffisso **-ato** seguito dal nome del radicale alchilico dell'alcol.



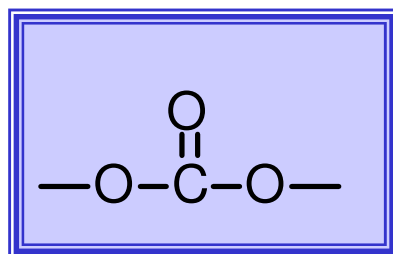
Metilacetato

Acetato di metile

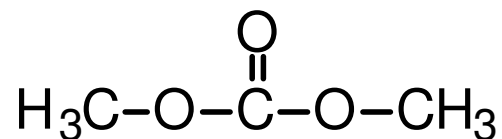
Gli esteri possiedono aromi molto piacevoli. Le caratteristiche fragranze di molti fiori e frutti si possono far risalire agli esteri che contengono. Per questo motivo sono utilizzati nei profumi e come agenti aromatizzanti per pasticceria e bibite.

Gruppi funzionali: carbonati

Gruppo
carbonato

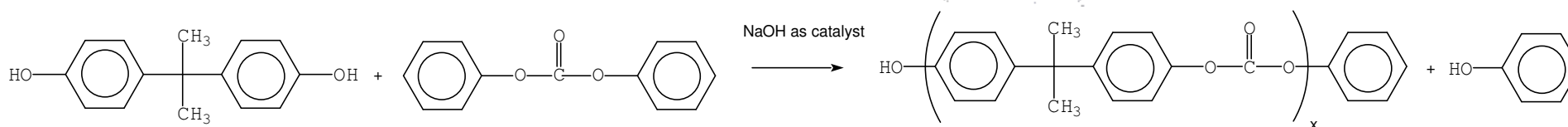
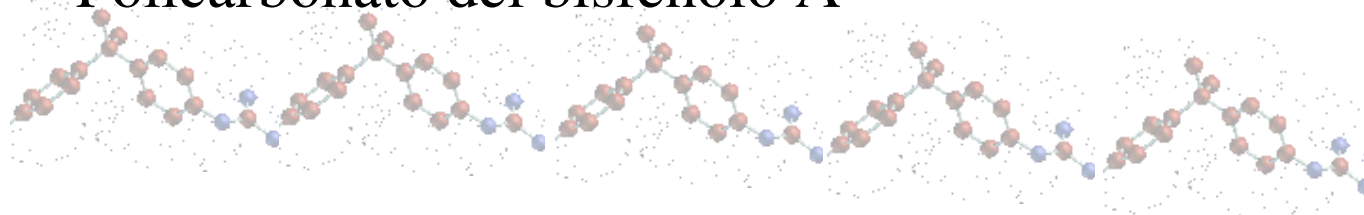


Sono formalmente dei derivati dell'acido carbonico H_2CO_3 esterificati due volte



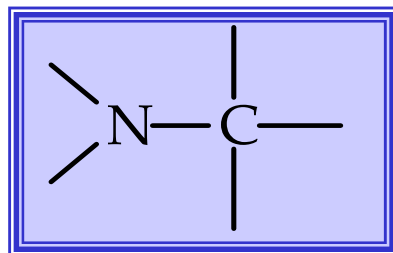
Dimetilcarbonato

Policarbonato del bisfenolo A



Gruppi funzionali: ammine

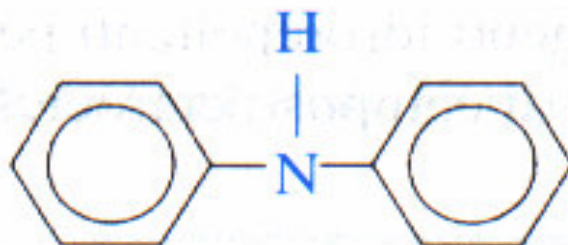
Sono descritti come derivati dell'ammoniaca per sostituzione di uno o più legami N-H con legami N-C.



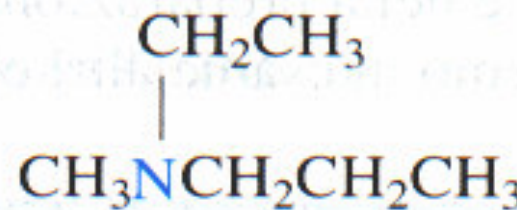
Sono divise in primarie, secondarie e terziarie.



etilammina
(una ammina primaria)



difenilammina
(una ammina secondaria)

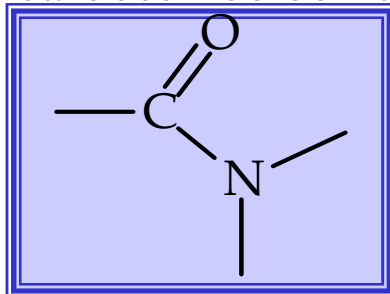


etilmetilpropilammina
(una ammina terziaria)

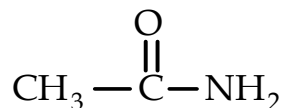
Per ammine semplici sono spesso usati nomi comuni; per quelle più complesse si usa il nome *ammino* per il gruppo funzionale -NH₂.

Gruppi funzionali: ammidi

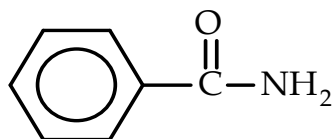
Derivano dalla reazione di un acido carbossilico con una ammina.



Il nome deriva da quello dell'acido corrispondente mediante la sostituzione del suffisso *-oico* con *ammide*.

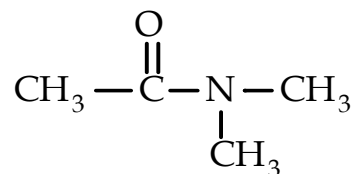


Etanammide (acetammide)



Benzammide

Se il gruppo $-\text{NH}_2$ contiene dei sostituenti l'ammide si dice **N-sostituita**



N,N-dimetiletanammide