



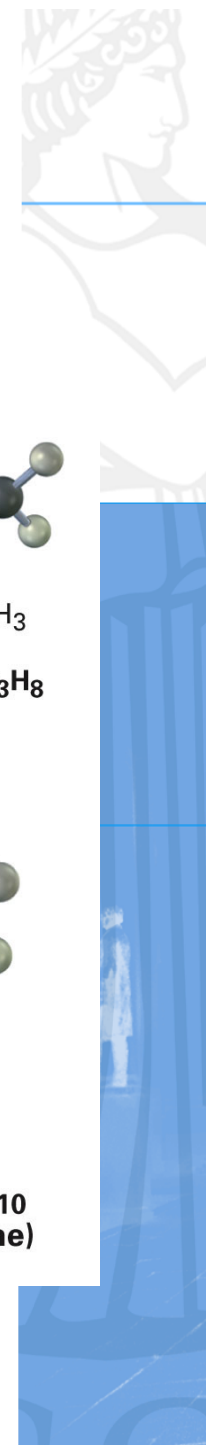
Kapittel 3

Organiske forbindelser:
Alkaner og deres stereokjemi

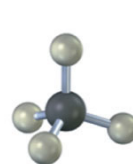
Alkaner – mettede hydrokarboner



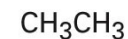
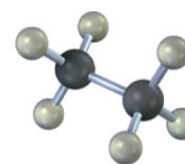
UNIVERSITETET
I OSLO



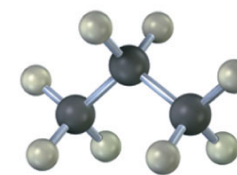
- Mettede hydrokarboner
 - Bare enkeltbindinger
 - Bare C og H
 - Generell formel C_nH_{2n+2}
- Upolare bindinger
 - Lite reaktive
 - “paraffin” = “uten affinitet”
 - Alifatiske forbindelser
- Ingen funksjonelle grupper



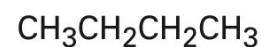
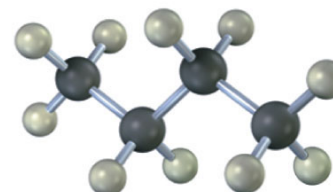
Methane, CH₄



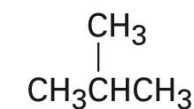
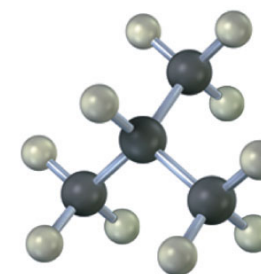
Ethane, C₂H₆



Propane, C₃H₈



Butane, C₄H₁₀

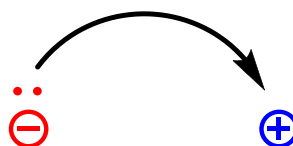


Isobutane, C₄H₁₀
(2-methylpropane)



Funksjonelle grupper

- Gruppe atomer i et molekyl, assosiert med kjemisk reaktivitet
 - Forutsigbar kjemisk reaktivitet
 - Oftest assosiert med områder i molekylet som er
 - Elektronfattige (elektrofile)
 - Elektronrike (nukleofile)
 - “Motsetninger tiltrekker hverandre”



- Elektronflyt fra et elektronpar (**elektronrikt sted**) til et **elektronfattig sted**



Utvalgte funksjonelle grupper (1)

Funksjonell gruppe	Stoffklasse	Prefiks – forstavelse (engelsk i parentes)	Suffiks – etterstavelse (engelsk i parentes)
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C} \\ \\ \text{OH} \end{array}$	karboksylsyre	karboksy-	-syre (-oic acid)
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C} \\ \\ \text{NH}_2 \end{array}$	amid	karbamoyl-	-amid (-amide)
$-\text{C}\equiv\text{N}$	nitril	cyano-	-nitril (-nitrile)
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C} \\ \\ \text{H} \end{array}$	aldehyd	formyl-	-al
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C}-\text{C}- \\ \quad \end{array}$	keton	okso- (oxo-)	-on (-one)
$-\text{OH}$	alkohol	hydroksy- (hydroxy-)	-ol
$-\text{SH}$	tiol	merkapt- (mercapto-)	-tiol (-thiol)
$-\text{N}-$	amin	amino-	-amin (-amine)

Utvalgte funksjonelle grupper (2)

Funksjonell gruppe	Stoffklasse	Prefiks – forstavelse (engelsk i parentes)	Suffiks – etterstavelse (engelsk i parentes)
$\begin{array}{c} \diagup \\ \text{C}=\text{C} \\ \diagdown \end{array}$	alken	alkenyl-	-en (-ene)
$\text{—C}\equiv\text{C—}$	alkyn	alkynyl-	-yn (-yne)
$\begin{array}{c} \diagup \quad \diagdown \\ \text{—C—C—} \\ \diagdown \quad \diagup \end{array}$	alkan	alkyl-	-an (-ane)
$\text{—OR} \quad \text{—OPh}$	eter	alkoksy-, fenoksy- (alkoxy-, phenoxy-)	-eter (ether)
$\begin{array}{cc} \text{—F} & \text{—Cl} \\ \text{—Br} & \text{—I} \end{array}$	halid	fluor-, klor-, brom-, jod- (fluoro-, chloro-, bromo-, iodo-)	
—NO_2		nitro-	

Stoffklassene er ordnet etter fallende prioritet:

En gitt forbindelse anses for å tilhøre den høyst prioriterte stoffklassen som er mulig ut fra hvilke funksjonelle grupper den har. Dette er av betydning for navnsettingen.



Isomeri

- Flere strukturformler kan ofte skrives for en forbindelse med en gitt bruttoformel
- Disse kalles isomerer
- Dersom atomene er bundet sammen i forskjellig rekkefølge, kalles disse *konstitusjonsisomere*
- Isomeri kan finnes i alle organiske stoffklasser
- Andre former for isomeri følger senere i kurset

Alkaner

Metan CH_4 1 isomer	Etan C_2H_6 1 isomer	Propan C_3H_8 1 isomer	Butan C_4H_{10} 2 isomerer	Pentan C_5H_{12} 3 isomerer
Heksan C_6H_{12} 5 isomerer	Heptan C_7H_{14} 7 isomerer	Oktan C_8H_{18} 18 isomerer	Nonan C_9H_{20} 35 isomerer	Dekan $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ 75 isomerer
Undekan $\text{C}_{11}\text{H}_{24}$ 159 isomerer	Dodekan $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$ 335 isomerer	Tridekan $\text{C}_{13}\text{H}_{28}$ 802 isomerer	Tetradekan $\text{C}_{14}\text{H}_{30}$ 1858 isomerer	Eicosan $\text{C}_{20}\text{H}_{42}$ 366319 isomerer
Heneicosan $\text{C}_{21}\text{H}_{44}$	Docosan $\text{C}_{22}\text{H}_{46}$	Tricosan $\text{C}_{23}\text{H}_{48}$	Tetracosan $\text{C}_{24}\text{H}_{50}$	Triacontan $\text{C}_{30}\text{H}_{62}$ 4111846763 isomerer
Hentriacontan $\text{C}_{31}\text{H}_{64}$	Dotriacontan $\text{C}_{32}\text{H}_{66}$	Tritriacontan $\text{C}_{33}\text{H}_{68}$	Triheksakontan $\text{C}_{63}\text{H}_{128}$ $4,37672 \times 10^{23}$ isomerer	Hektan $\text{C}_{100}\text{H}_{202}$ $5,92107 \times 10^{39}$ isomerer

Kun antall konsitusjonsisomerer er listet. Stereoisomerer kommer i tillegg!

Navnsetting av organiske forbindelser



UNIVERSITETET
I OSLO



- IUPAC nomenklatur for organiske molekyler
 - International Union of Pure and Applied Chemistry
 - http://en.wikipedia.org/wiki/IUPAC_nomenclature_of_organic_chemistry
 - <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>
- Norsk nomenklatur
 - Skolelaboratoriets sider
 - <http://www.mn.uio.no/kjemi/forskning/grupper/skole/nomenklatur/>

Nettsidene er forfattet av Vivi Ringnes i 2008 og bygger på hennes bok “Navn på Kjemiske stoffer” (Cappelens forlag, 1996).
Boken er ikke lenger i salg.
- ChemDraw har en kjekk funksjon:
“Convert structure to name” (og motsatt)

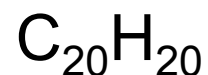
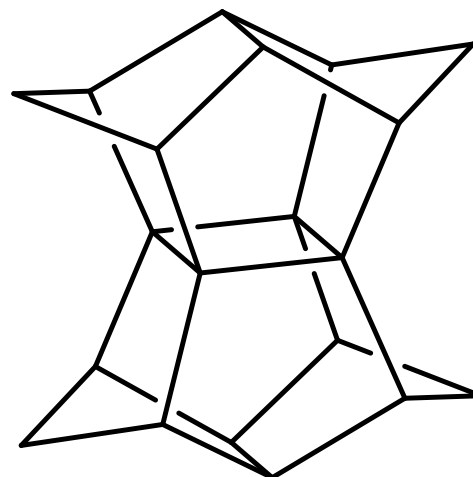
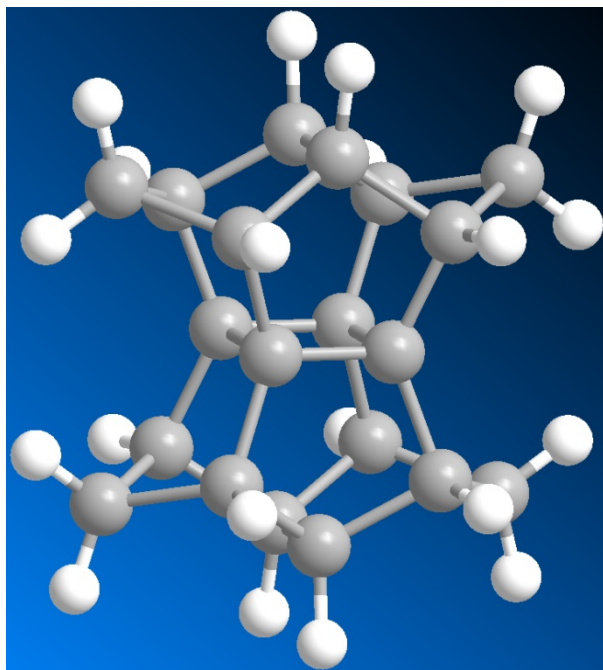
Trivialnavn vs. systematiske navn



UNIVERSITETET
I OSLO

Unadecacyclo[9.9.0.0^{1,5}.0^{2,12}.0^{2,18}.0^{3,7}.0^{6,10}.0^{8,12}.0^{11,15}.0^{13,17}.0^{16,20}]eicosane

Eller hvorfor ikke rett og slett *pagodan* ?



“Molecules with silly names”:

<http://www.chm.bris.ac.uk/sillymolecules/silbymols.htm>

Navnsetting av organiske forbindelser



UNIVERSITETET
I OSLO



- Trivialnavn og systematiske navn
 - effektivitet vs. presisjon i kommunikasjon med kolleger
- Prefiks – stamme – posisjon – suffiks
 - prefiks angir plassering av og navn på substituenten
 - stamme angir antall C-atomer i hovedkjeden
 - stammen er den lengste karbonkjeden som inneholder den høyst prioriterte funksjonelle gruppen
 - posisjon angir plassering av høyst prioriterte funksjonelle gruppe
 - suffiks angir hva som er den høyst prioriterte funksjonelle gruppen
 - suffikset definerer hvilken stoffklasse forbindelsen tilhører
- Vi vil bare introdusere en begrenset del av det omfattende navnsettingssystemet i dette kurset
 - Det er viktigere å forstå selve *kjemien* til forbindelsene

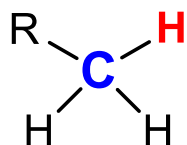


Navnsetting av alkaner

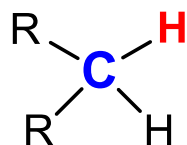
- Finn den lengste karbonkjeden. Hovedkjedens navn defineres fra antall C i kjeden
 - Hvis to kjeder er like lange, velges den som har flest forgreninger
- Karbonatomene i hovedkjeden nummereres fra 1 og oppover
 - Nummereringen starter i den enden som er nærmest første forgrening (ved likhet – gå til eventuelt forgrening nr. 2, osv.)
- Grupper som er bundet til hovedkjeden (substituenten) navngis og nummereres, og angis som forstavelse(r) til hovedkjedens navn
 - Substituentene angis i alfabetisk rekkefølge
 - Flere like substituenten angis med di-, tri-, tetra- osv. der denne lille forstavelsen ikke tas med i alfabetiseringen. Plasseringen angis for hvert tilfelle av hver substituent
- Forbindelsens navn skrives ut i ett ord

Alkylgrupper

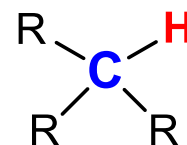
- En gruppe som fås ved å fjerne et hydrogenatom fra et alkan
- Navnet fås ved å erstatte alkanets –an etterstavelse med –yl
- “R” brukes som betegnelse på en generell alkylgruppe



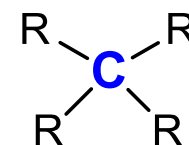
primært C
primært H



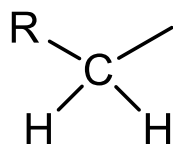
sekundært C
sekundært H



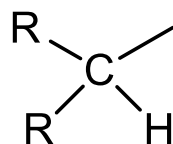
tertiært C
tertiært H



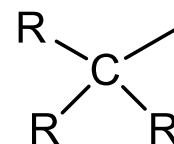
kvaternært C



primær
alkylgruppe



sekundær
alkylgruppe



tertiær
alkylgruppe

C₆₀ eller Buckminsterfullerene

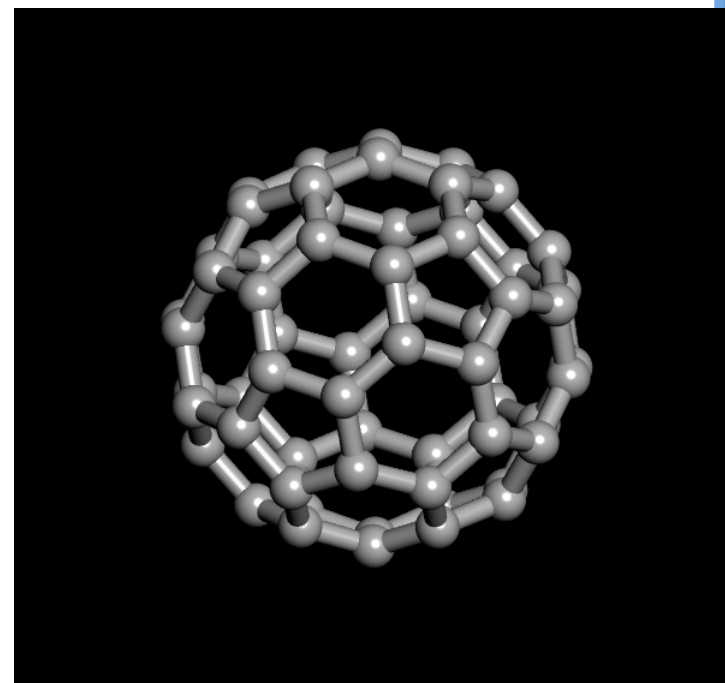
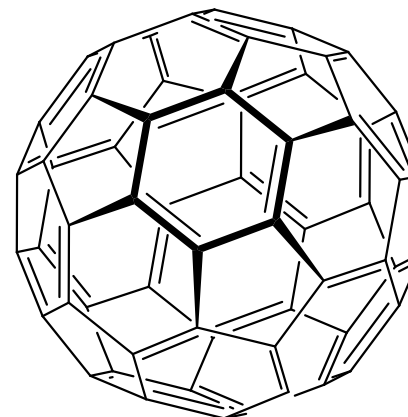
Systematisk navn i følge en tidligere versjon av IUPACs navnsettingsregler:

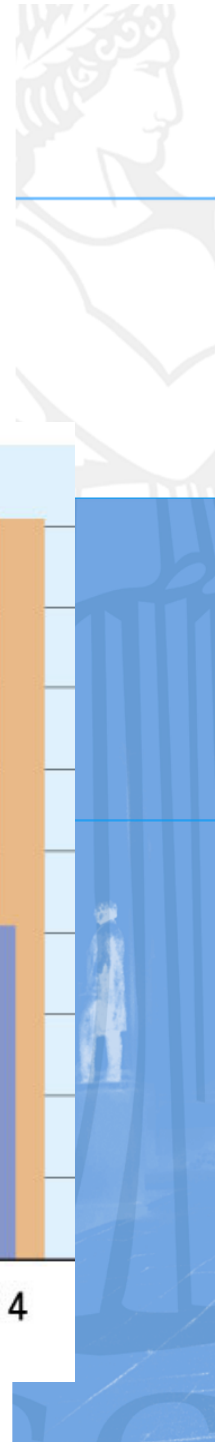
hentriacontacyclo[29.29.0.0^{2,24}.0^{3,12}.0^{4,59}.0^{5,10}.0^{6,58}.0^{7,55}.0^{8,53}.0^{9,21}.0^{11,20}.0^{13,18}.0^{15,30}.0^{16,28}.0^{17,25}.0^{22,52}.0^{23,50}.0^{26,49}.0^{27,47}.0^{29,45}.0^{32,44}.0^{33,60}.0^{34,57}.0^{35,43}.0^{36,56}.0^{37,41}.0^{38,54}.0^{39,51}.0^{40,48}.0^{42,46}]hexaconta-1,3,5(10),6,8,11(18),14,-16,19,21,23,25,27,29(45),30,32(44),33,-35(43),36,38(54),39(51),40(48),41,46,49,-52,55,57,59-triacontaene

Navn etter dagens regler:

C₆₀-I_h[5,6]fullerene

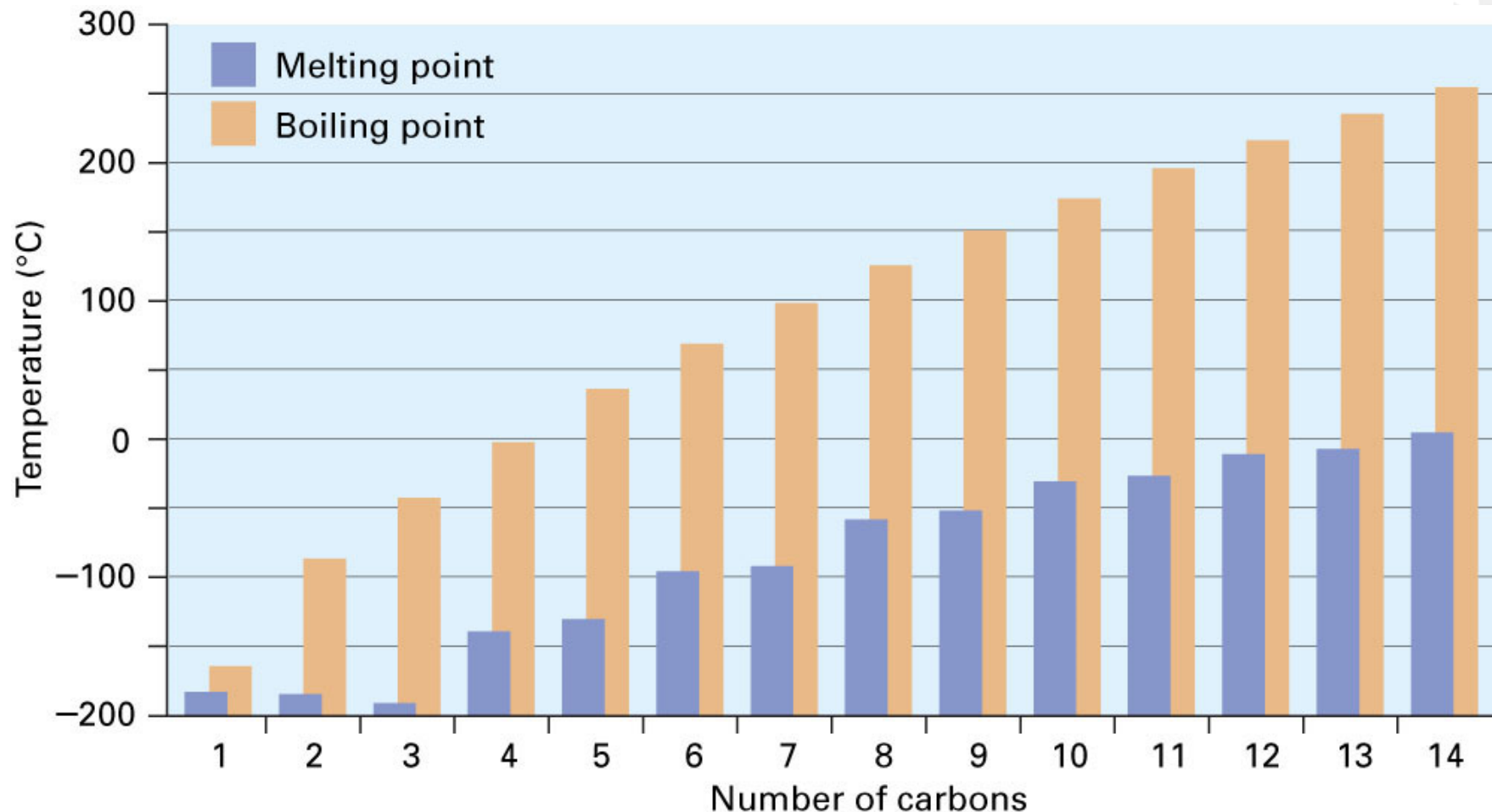
Navnsettingsreglene er med andre ord under stadig utvikling...heldigvis !





Alkaners fysikalske egenskaper

- Smeltepunkt og kokepunkt øker med økende størrelse på alkanet
- Data for rettkjedete alkaner, $\text{CH}_4 - \text{C}_{14}\text{H}_{30}$





Alkaners reaktivitet

- Generelt lite reaktive
- Reagerer med Cl_2 og Br_2
 - Behov for aktivering med UV-lys ($h\nu$) eller varme (Δ)
 - Introducerer funksjonelle grupper $-\text{Cl}$ og $-\text{Br}$
 - Lite selektive reaksjoner
- Reagerer med luftas O_2
 - Forbrenning til CO_2 og H_2O
 - Meget eksoterm reaksjon



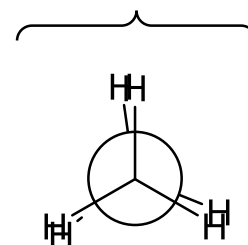
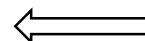
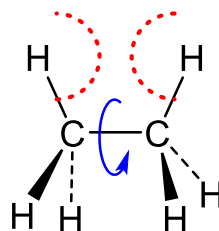


Konformasjoner

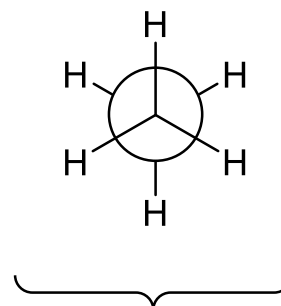
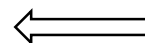
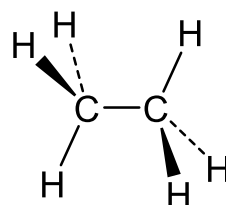
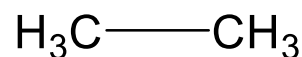
- Det er “fri rotasjon” rundt C-C enkeltbindinger (og andre enkeltbindinger)
- Forskjellige atomer eller grupper i molekylet kan dermed få forskjellig romlig orientering i forhold til hverandre
- Disse forskjellige øyeblikks-strukturene kalles *konformasjoner*
- Konformasjonsanalyse er en viktig del av den organiske kjemien
 - eks. enzym-substrat interaksjoner

Konformasjoner av etan, C_2H_6

torsjons-spenninger
frastøtning
destabiliserende



"eclipsed"
overskyggende



"staggered"
mellomliggende

Newman-projeksjoner

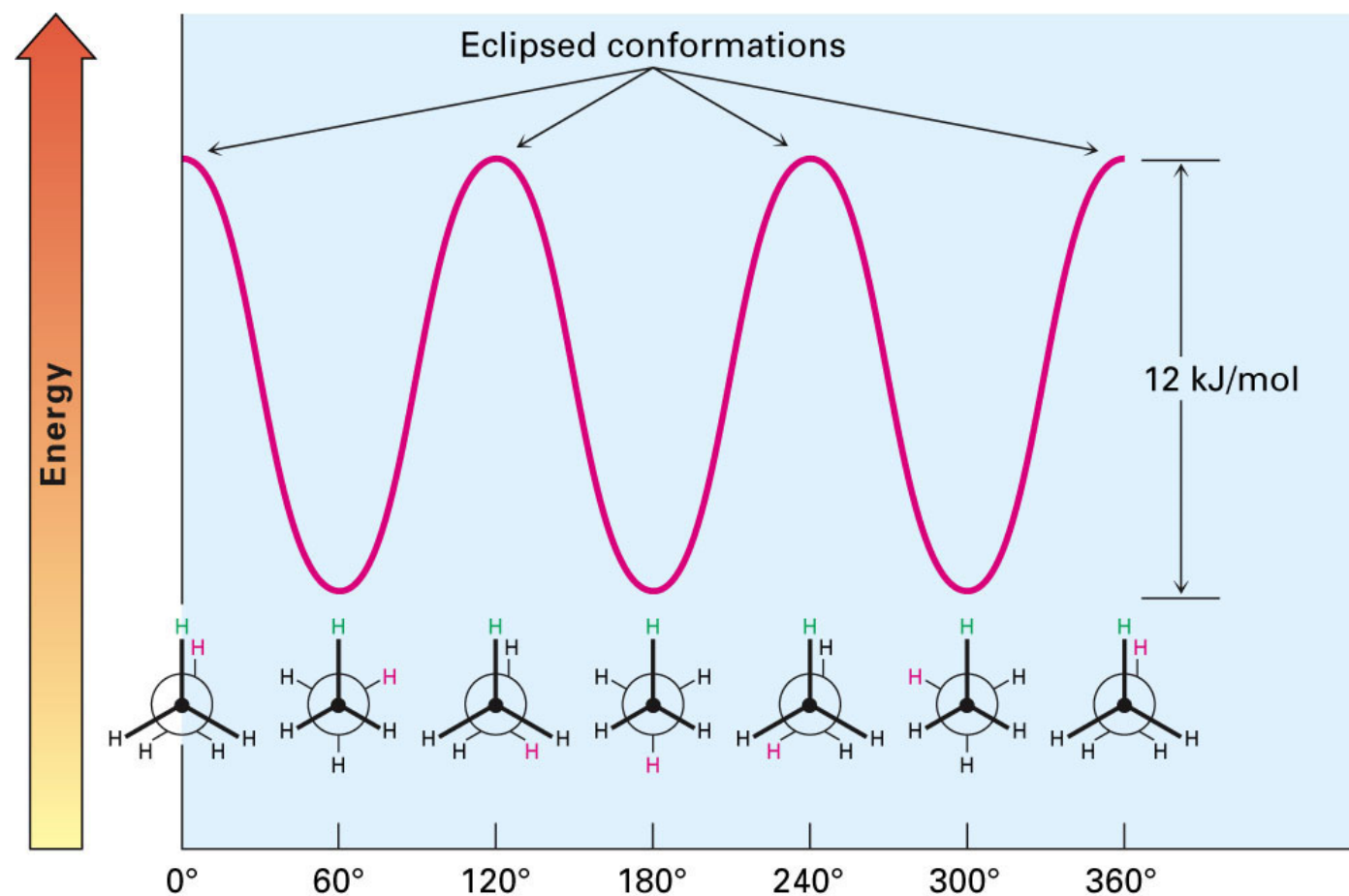
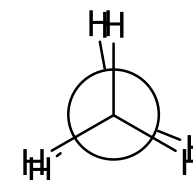
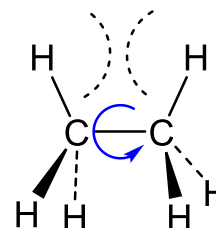


Melvin Spencer Newman
(1908-1993)

Konformasjoner av etan



UNIVERSITETET
I OSLO



Konformasjoner av butan

