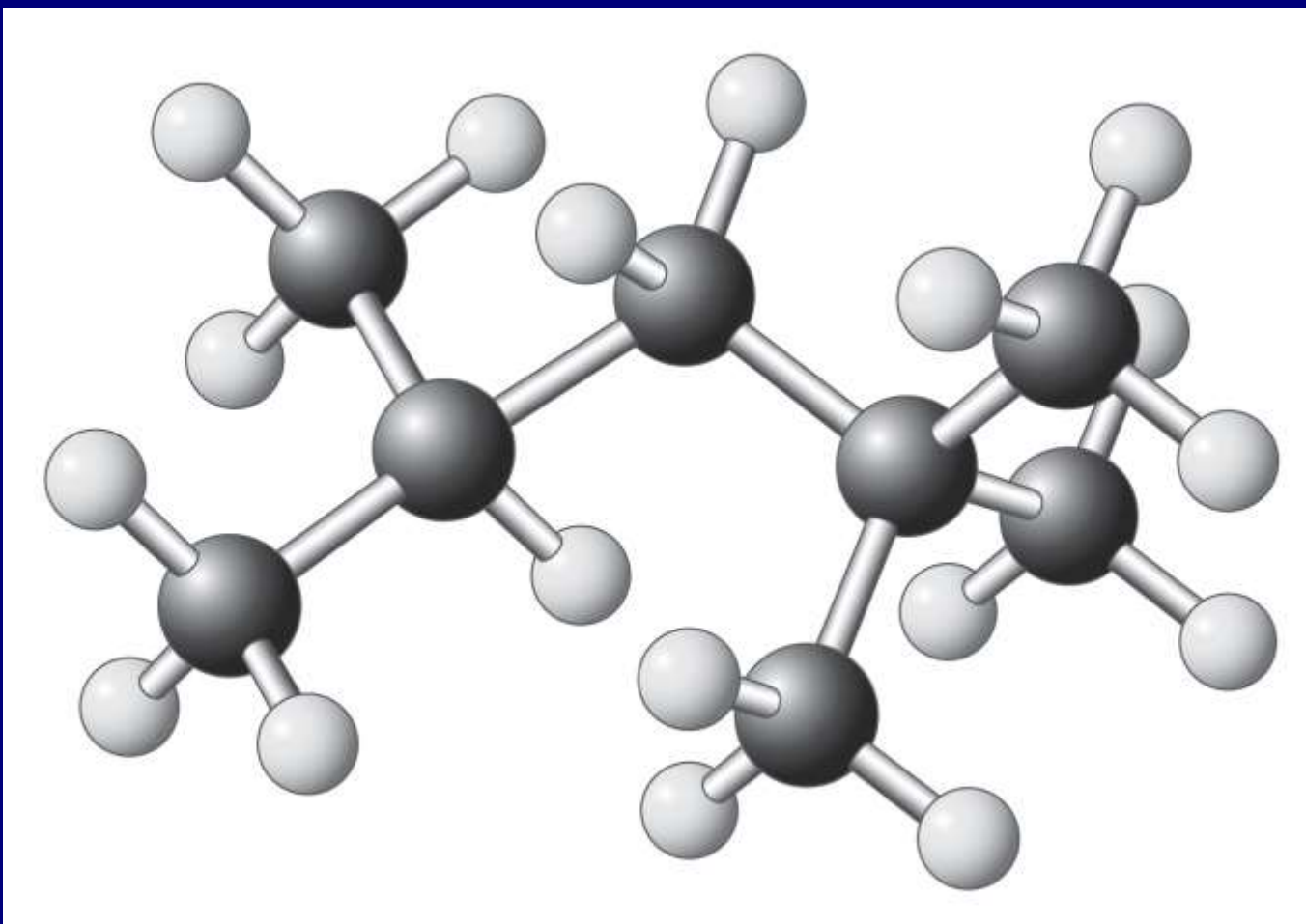
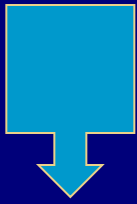


Poglavlje 2: Struktura i reaktivnost, alkani



2,2,4-Trimetilpentan:
oktan

Nafta!!

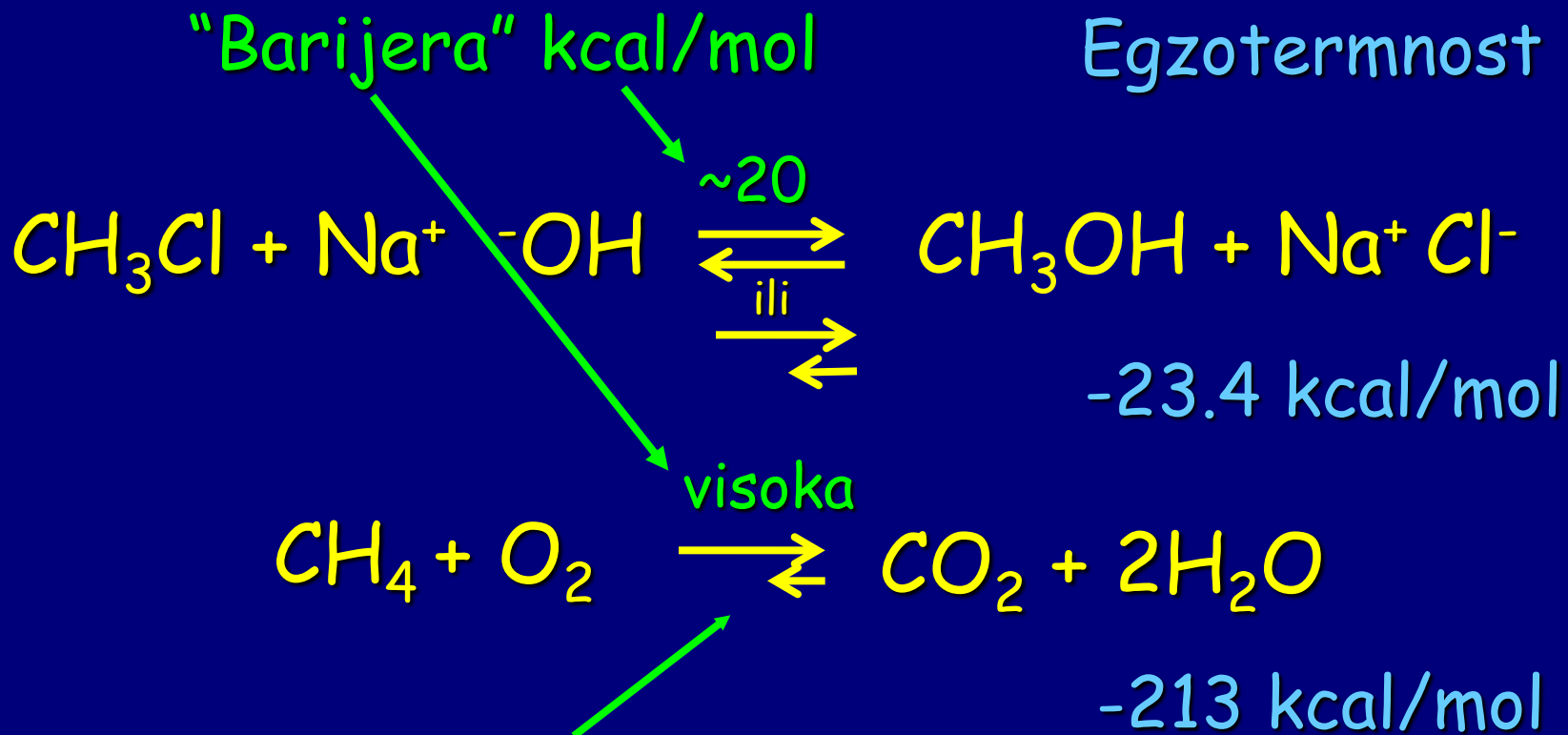


Sagorevanje

kvalitet goriva
oktanski broj



Za sve reakcije je karakteristična ravnoteža



Ravnoteža veoma pomerená na desno.

Šta nam govore ove ravnoteže?

Kinetika i termodinamika jednostavnih hemijskih procesa

1. Hemijska termodinamika:

Promena energije do kojih dolazi tokom reakcije

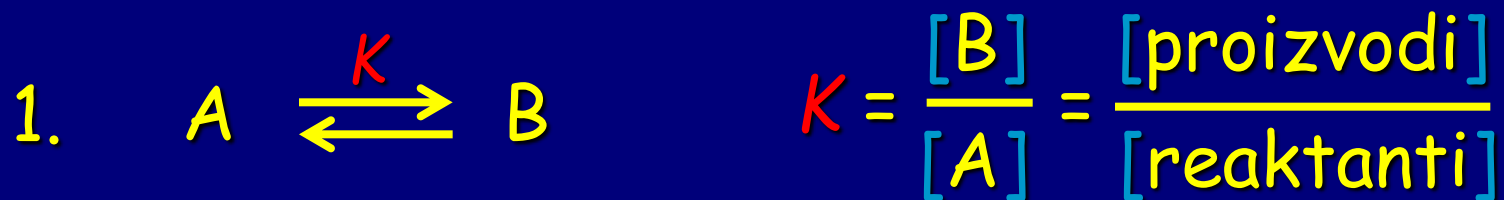
2. Hemijska kinetika:

Koliko brzo se uspostavlja ravnoteža; brzina nestanka polaznog materijala ili brzina nastanka proizvoda.

Ova dva principa mogu, ali ne moraju biti povezani

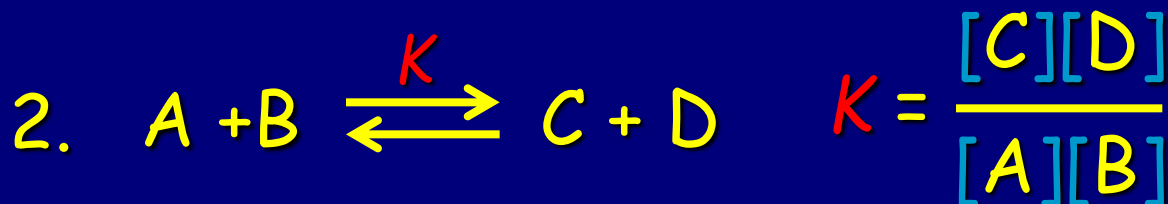
Reakcije koje su termodinamički veoma povoljne često se vrše brže od onih koje su manje povoljne

Ravnoteža: dva tipična slučaja



K = ravnotežna konstanta

$[]$ = koncentracija u mol L⁻¹



Velika vrednost K ukazuje da će reakcija ići do kraja; kaže se da ima veliku vučnu silu (veliku pokretačku snagu)

Ravnotežna konstanta direktno zavisi od promene standardne Gibbs-ove slobodne energije ΔG°

Gibbs-ova slobodna energija, ΔG°

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K = -2.3 RT \log K$$

T apsolutna temperatura u kelvinima

R = gasna konstanta $\sim 1,986 \text{ cal K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
($8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$)

Velika vrednost K :

negativna ΔG° (oslobađa se energija)

Ravnoteža i slobodna energija

na 25°C (298°K): $\Delta G^\circ = -1.36 \log K$

TABELA 2-1

Ravnoteža i slobodna energija za $A \rightleftharpoons B$; $K = [B]/[A]$

| K | procenat | | ΔG° (kcal mol ⁻¹ na 25°C) |
|--------|----------|------|--|
| | B | A | |
| 0.01 | 0.99 | 99.0 | +2.73 |
| 0.1 | 9.1 | 90.9 | +1.36 |
| 0.33 | 25 | 75 | +0.65 |
| 1 | 50 | 50 | 0 |
| 2 | 67 | 33 | -0.41 |
| 3 | 75 | 25 | -0.65 |
| 4 | 80 | 20 | -0.82 |
| 5 | 83 | 17 | -0.95 |
| 10 | 90.9 | -9.1 | -1.36 |
| 100 | 99.0 | 0.99 | -2.73 |
| 1,000 | 99.9 | -0.1 | -4.09 |
| 10,000 | 99.99 | 0.01 | -5.46 |

Entalpija ΔH° i Entropija ΔS°

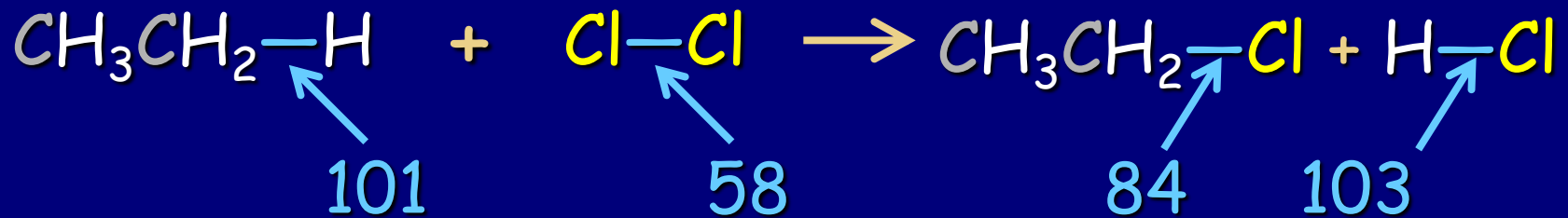
$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$$

ΔH° je u jedinici Kcal mol^{-1} , a ΔS° je u jedinici $\text{cal}^{-1} \text{K}^{-1} \text{mol}^{-1}$ ili entropijske (e.u.) jedinice,

Entalpija ΔH° = toplota reakcije na konstantnom pritisku;

$$\Delta H^\circ = (\text{zbir energija raskinutih veza}) - (\text{zbir energija formiranih veza})$$

Primer:



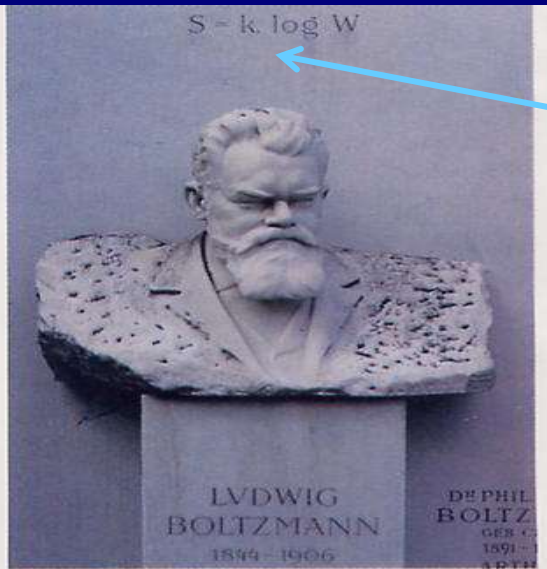
$$\Delta H^\circ = 159 - 187 = -28 \text{ kcalmol}^{-1}$$

Kada je ΔH° negativna, reakcija se definiše kao "egzotermna", pozitivna vrednost ΔH° karakteristična je za „endoterman“ proces

ΔS° predstavlja merilo uređenosti sistema. Priroda teži neuređenosti.

ΔS° raste sa povećanjem neuređenosti; pozitivna vrednost ΔS° negativno utiče na ΔG°

Boltzmann's Tombstone (1844-1906)

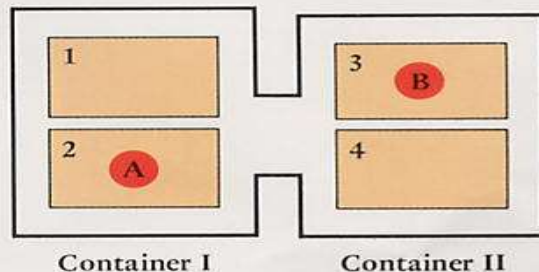
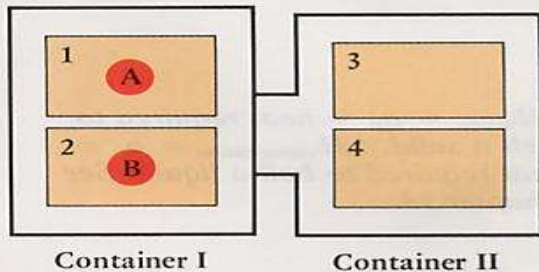


$$S = k \times \log W$$

Entropija

Boltzmann'ova konstanta

"haos"
(Mikrostanje ili stepen slobode)



Dve loptice u dve kutije:

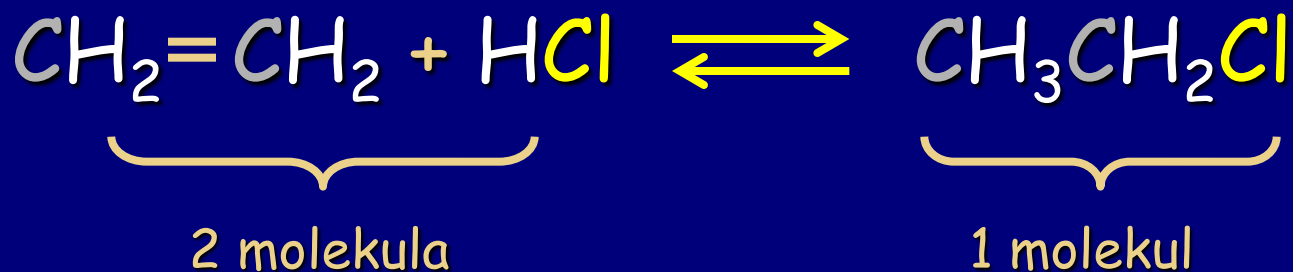
A. Zajedno u jednoj kutiji:

1 načina

B. U dve kutije:

6 načina: 1-2, 1-3, 1-4, 2-3, 2-4, 3-4

Primeri:



$$\Delta H^\circ = -15.5 \text{ kcal mol}^{-1}$$

$$\Delta S^\circ = -31.3 \text{ e.u.}$$

$$\underline{\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ = -6.17 \text{ kcal mol}^{-1}}$$

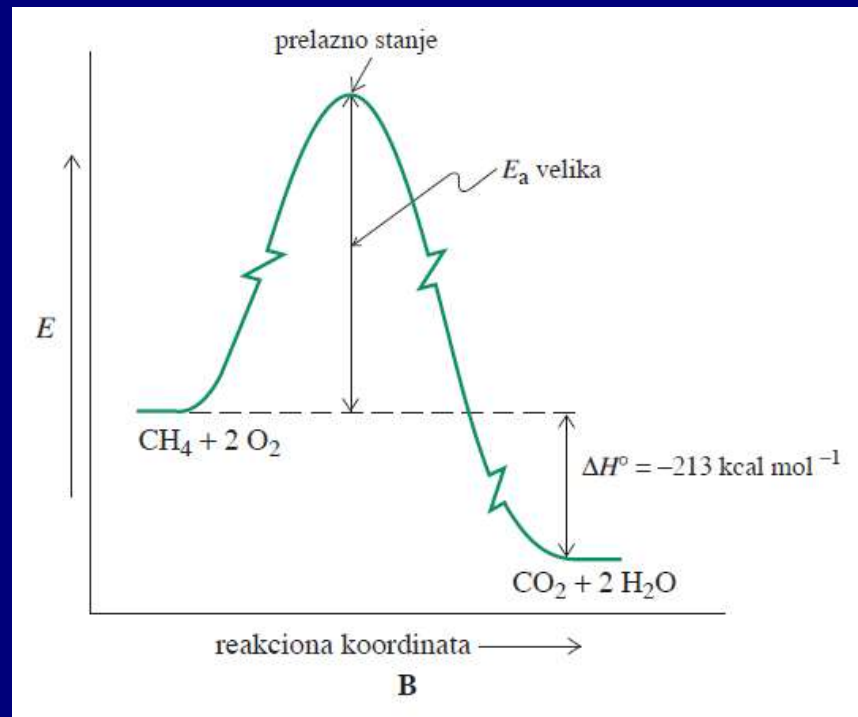
Ukoliko se broj molekula u reakciji ne menja, ΔS° je malo pa se zanemaruje činioc $T\Delta S^\circ$; u tom slučaju ΔH° kontroliše reakciju

Brzina reakcije

Za sve procese je karakteristična "energija aktivacije", barijera koja se mora savladati da bi se reakcija odvijala

Na brzinu reakcije utiče:

1. Visina barijere
(struktura i energija prelaznog stanja TS)



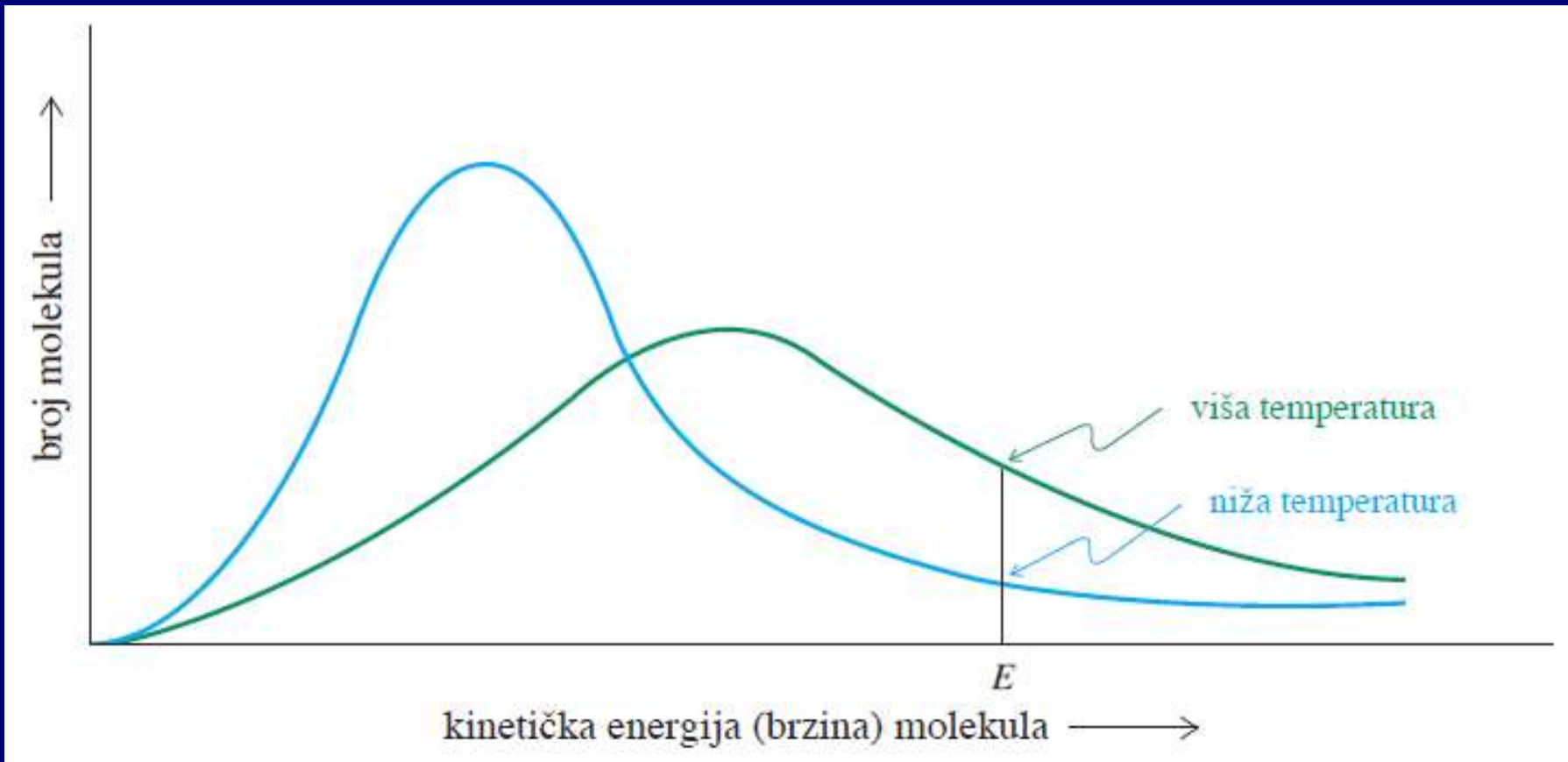
2. Koncentracija (broj sudara se povećava sa povećanjem koncentracije)

3. T (sa povećanjem T molekuli se brže kreću; broj sudara raste)

4. Faktor "verovatnoće" (koliko sudara dovodi do reakcije)

Boltzmann-ova raspodela

Odakle molekulima energija zaprelazak barijere?



Molekuli poseduju kinetičku energiju koja je na sobnoj temperaturi u proseku ~ 0.6 kcal/mol.

Brzina reakcije



Brzina = $k[A]$ \longrightarrow reakcija prvog reda

monomolekulska reakcija (TS sadrži samo A)



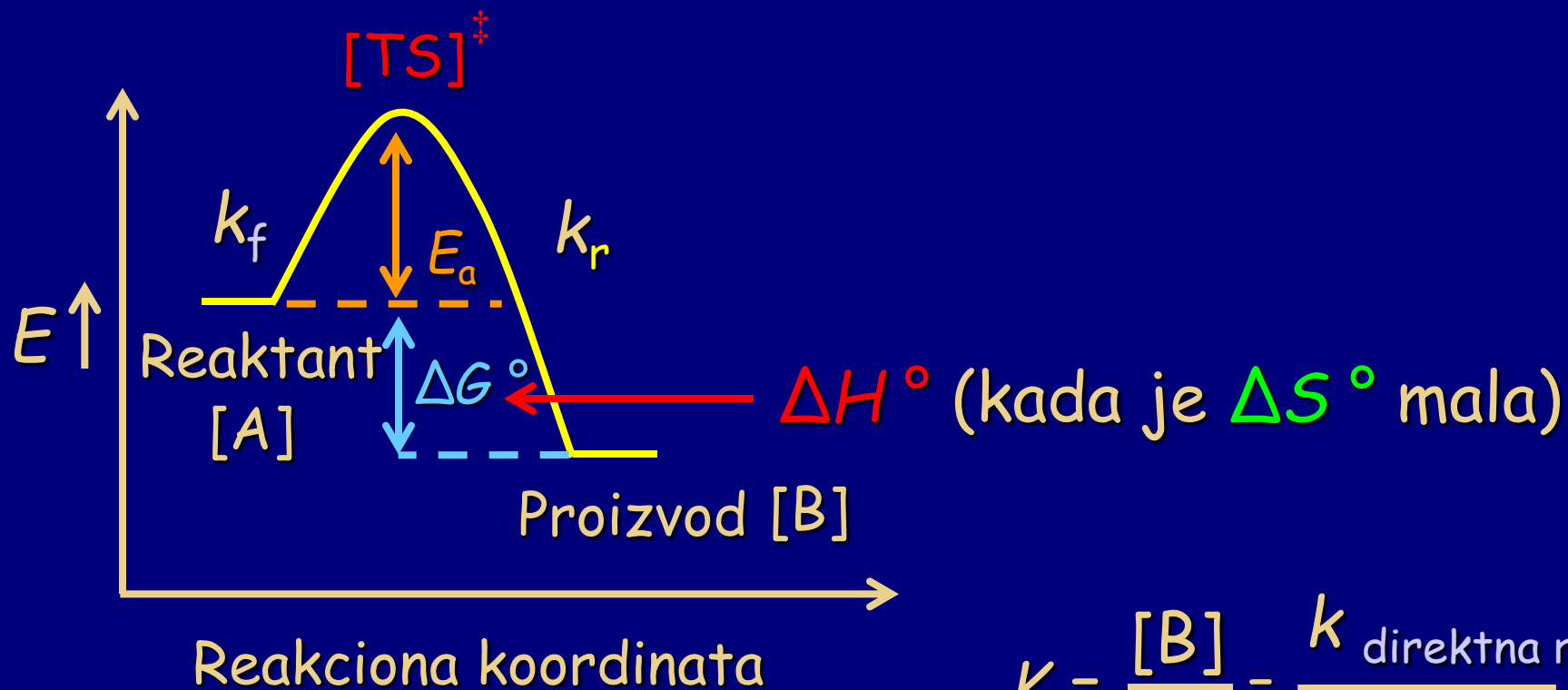
Brzina = $k[A][B]$ \longrightarrow reakcija drugog reda

Bimolekulska reakcija (TS sadrži oba molekula, A i B).

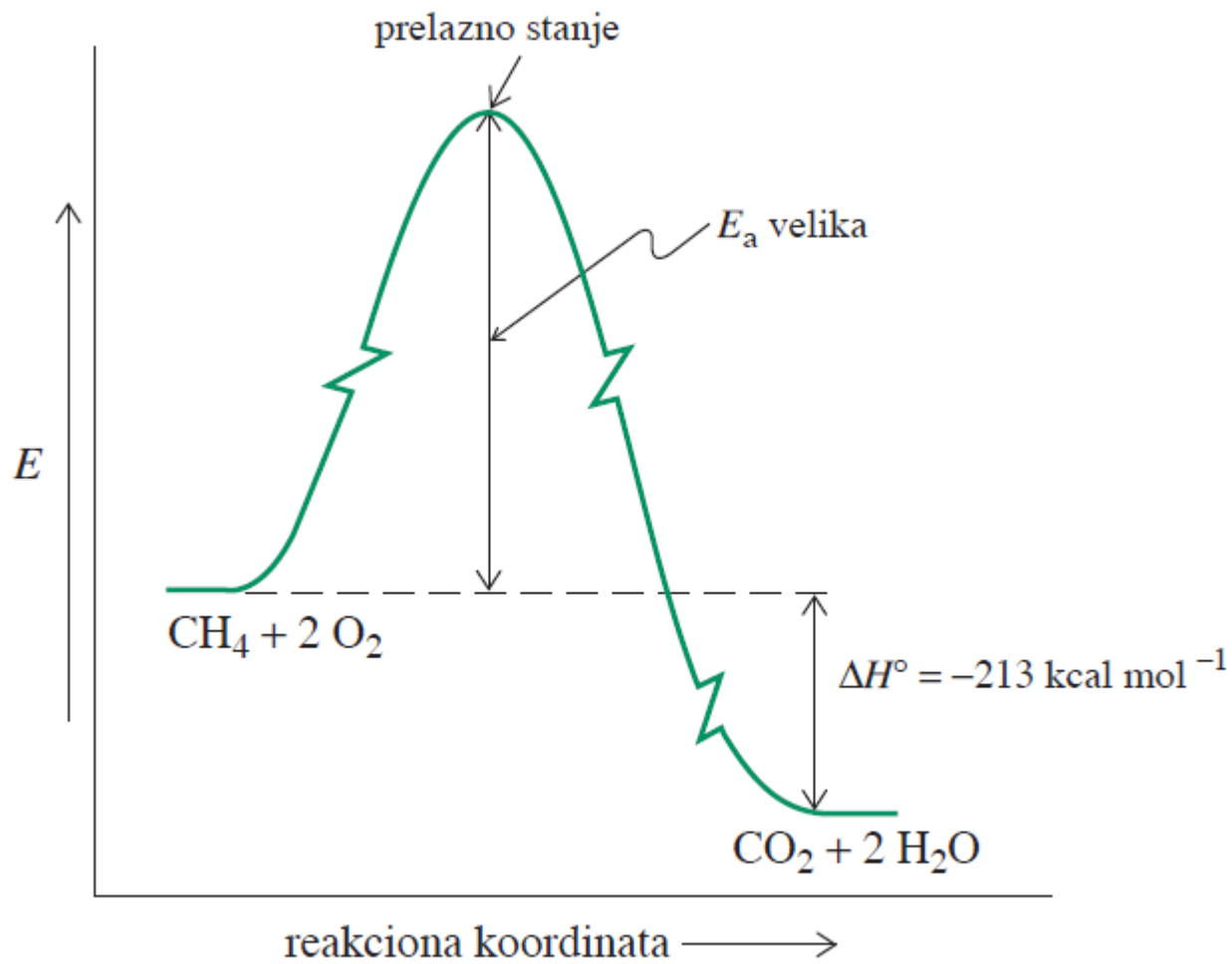
Arrhenius-ova jednačina opisuje uticaj temperature na brzinu reakcije:

$$k = Ae^{\frac{-E_a}{RT}} \text{ na visokim } T, k = A, \text{ "maksimalna brzina"}$$

Dijagram potencijalne energije



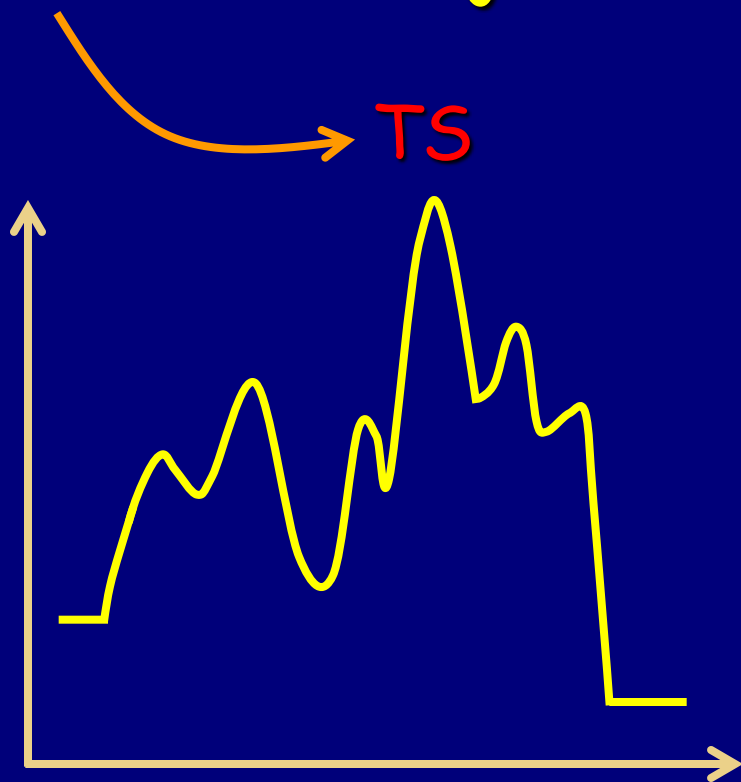
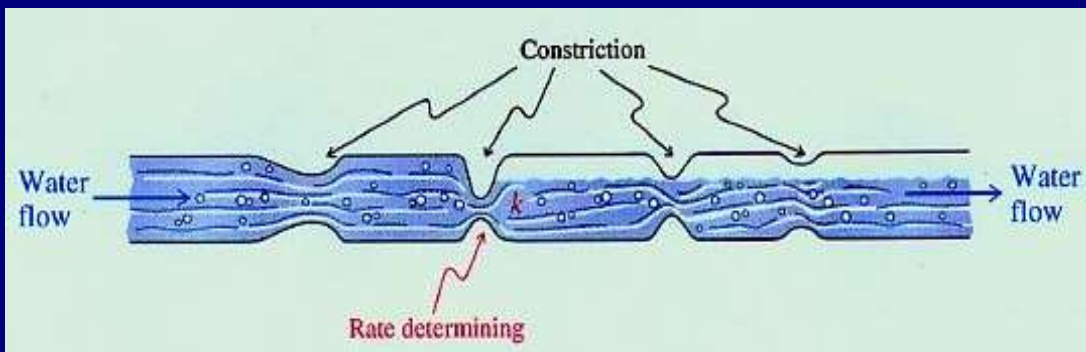
$$K = \frac{[B]}{[A]} = \frac{k_{\text{direktna r.}}}{k_{\text{povrtna r.}}}$$



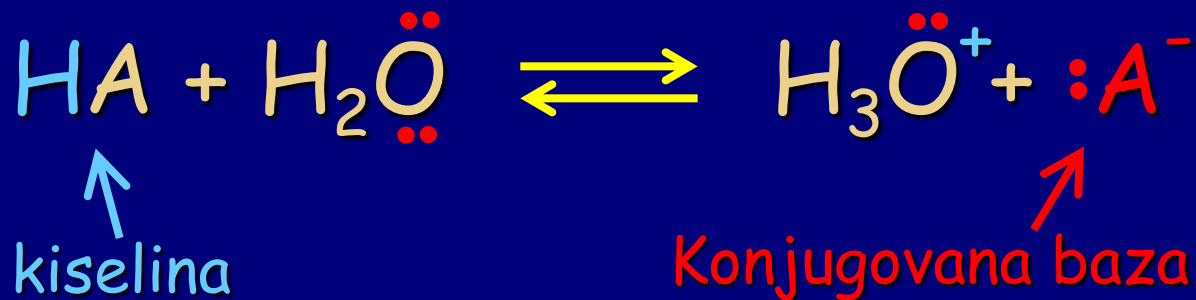
B

Korak koji određuje brzinu reakcije

Neke reakcije se odvijaju u više koraka, ali najsporiji korak određuje brzinu reakcije (usko grlo).



Kiselo-Bazna ravnoteža



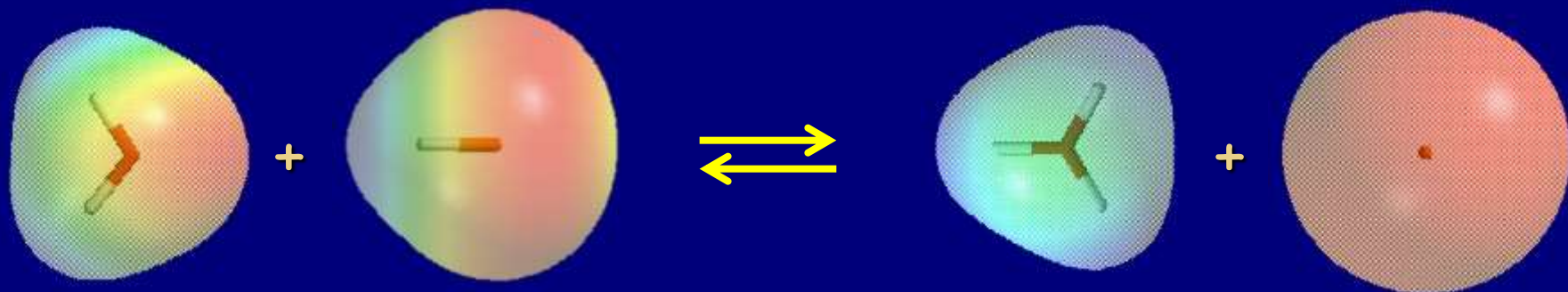
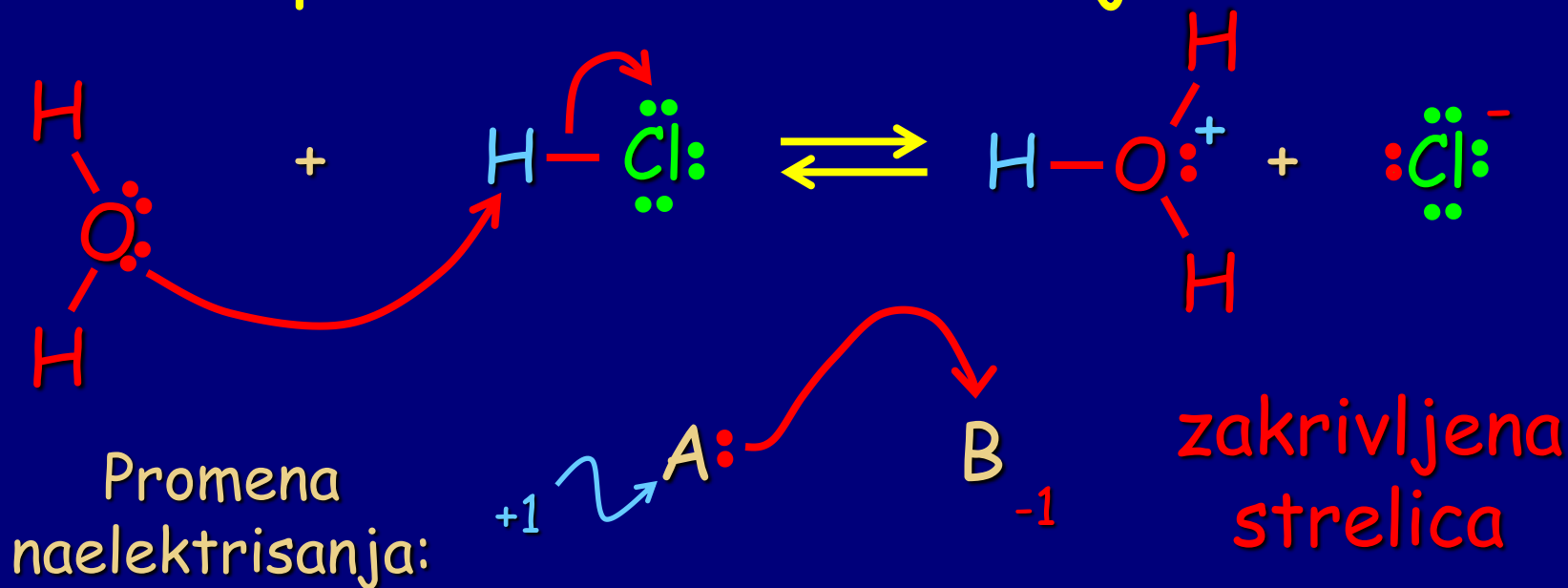
Brønsted i Lowry:

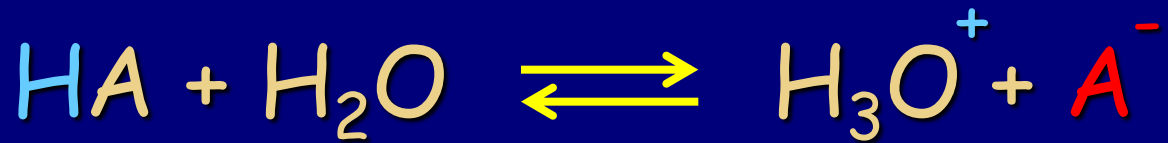
kiseline = donori protona

baze = akseptori protona

Kiseline-Baze:

pomeranje elektronskih parova
promena naelektrisanja





$$K = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{A}^-]}{[\text{HA}][\text{H}_2\text{O}]}$$

← Rastvarač 55 mol/L

Konstanta
kiselosti

$$K_a = K \times 55 = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$$

$$\text{p}K_a = -\log K_a$$

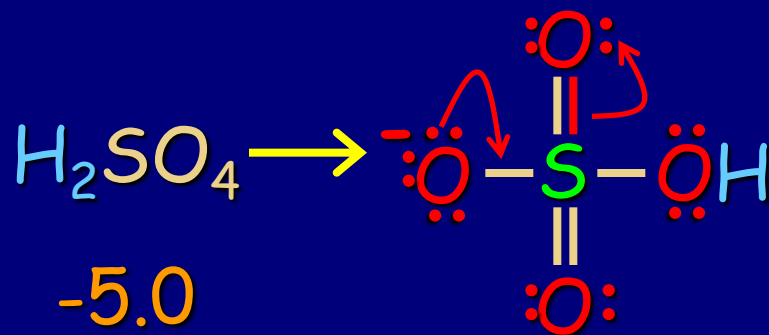
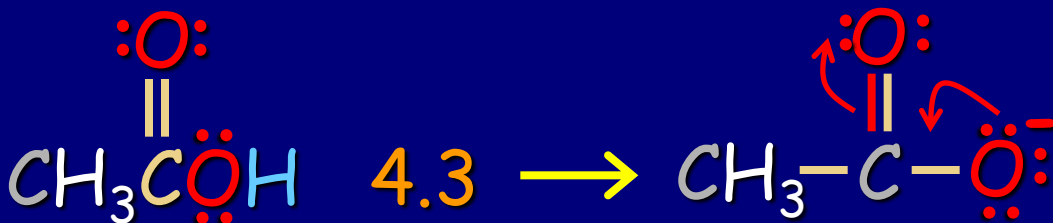
Procena relativne jačine kiselina i baza

Na kiselost utiču sledeće osobine konjugovane baze A^- :

1. Veličina A : raste odozgo nadole a tako raste i kiselost $HF < HCl < HBr < HI$ (slabi veza $H\text{---}A$; naelektrisanje je bolje stabilizovano u većoj orbitali)

2. Elektronegativnost A : veća elektronegativnost jača kiselost = $NH_3 < H_2O < HF$

3. Rezonancija kod A : pK_a



Relativna jačina kiselina

TABELA 2-2

Relativna jačina uobičajenih kiselina (25 ° C)

| Kiselina | K_a | p K_a |
|--|----------------------------|-------------------|
| jodovodonična kiselina, HI (najjača kiselina) | 1.6×10^5 | -5.2 |
| sumporna kiselina, H ₂ SO ₄ | 1.0×10^5 | -5.0 ^a |
| bromovodonična kiselina, HBr | 5.0×10^4 | -4.7 |
| hlorovodonična kiselina, HCl | 160 | -2.2 |
| hidronijum-jon, H ₃ O ⁺ | 50 | -1.7 |
| azotna kiselina, HNO ₃ | 25 | -1.4 |
| metansulfonska kiselina, CH ₃ SO ₃ H | 16 | -1.2 |
| fluorovodonična kiselina, HF | 6.3×10^{-4} | 3.2 |
| sirćetna kiselina, CH ₃ COOH | 2.0×10^{-5} | 4.7 |
| cijanovodonik, HCN | 6.3×10^{-10} | 9.2 |
| amonijum-jon, NH ₄ ⁺ | 5.7×10^{-10} | 9.3 |
| metantiole, CH ₃ SH | 1.0×10^{-10} | 10.0 |
| metanol, CH ₃ OH | 3.2×10^{-16} | 15.5 |
| voda, H ₂ O | 2.0×10^{-16} | 15.7 |
| amonijak, NH ₃ | 1.0×10^{-35} | 35 |
| metan, CH ₄ (najslabija kiselina) | $\sim 1.0 \times 10^{-50}$ | ~ 50 |

Napomena: $K_a = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$ mol L⁻¹.

^aPrva konstanta disocijacije.

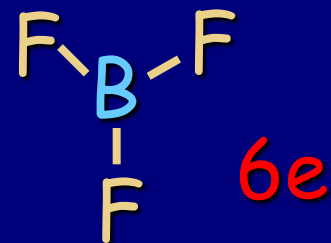
↑
jaka

slaba

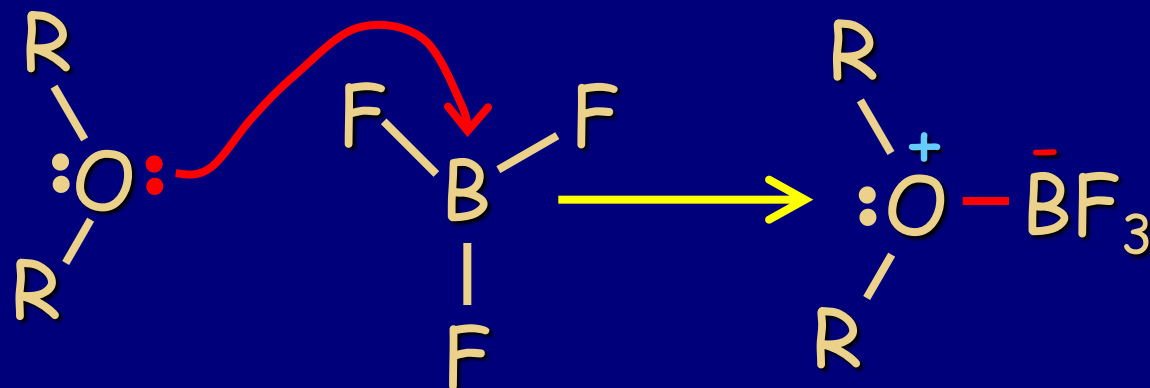
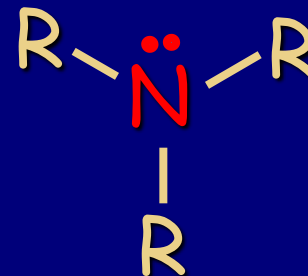
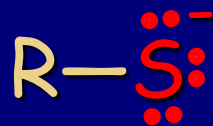
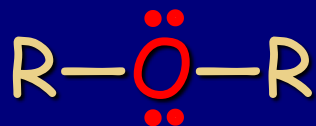
veoma
slaba

Lewis -ove kiseline i baze

Lewis-ove kiseline: elektron-deficitarne vrste (nedostaje e-par)



Lewis-ove baze: Sadrže slobodan elektronski par



zakrivljena
strelica

Lewis -ove kiseline i baze

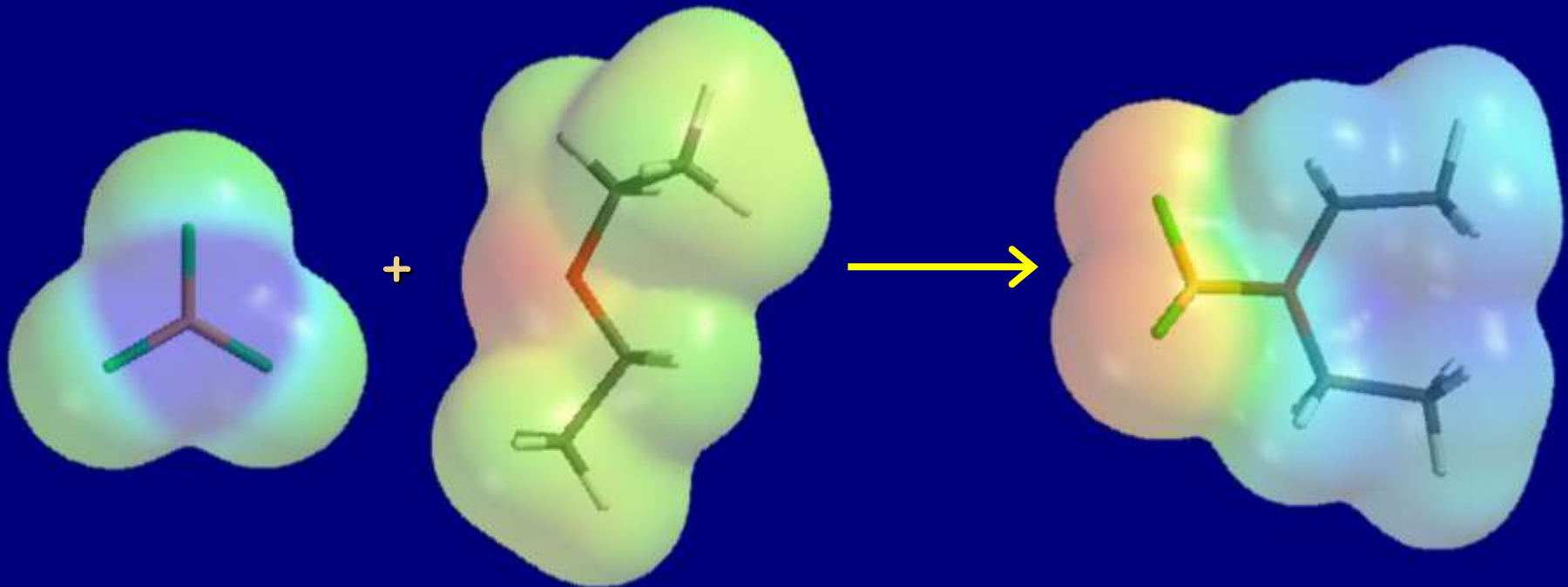
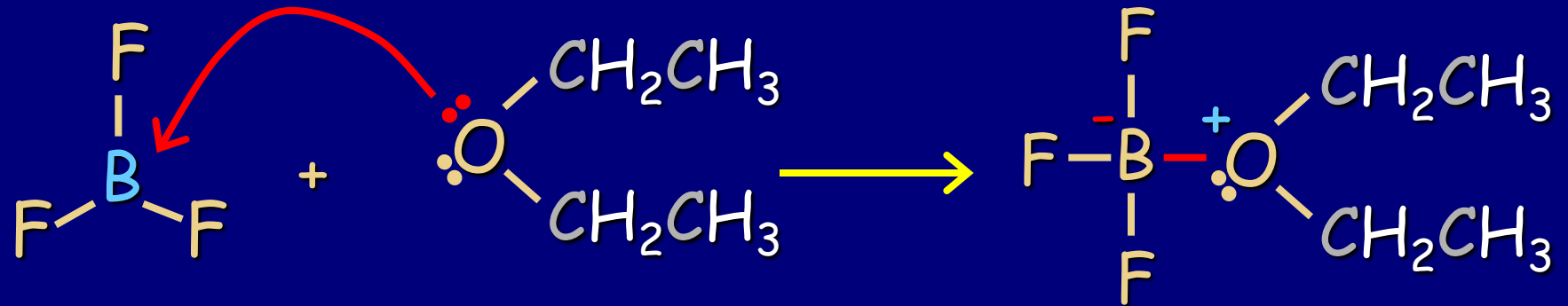
Lewis -ove baze:

donori elektronskog para

Lewis -ove kiseline:

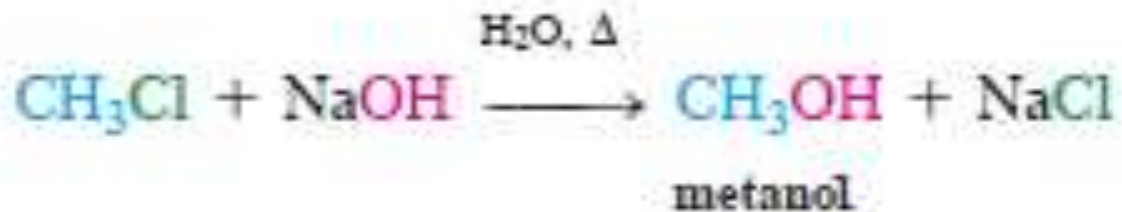
akceptori elektronskog para

Reakcija Lewis-ovih kiselina i baza elektrostatika

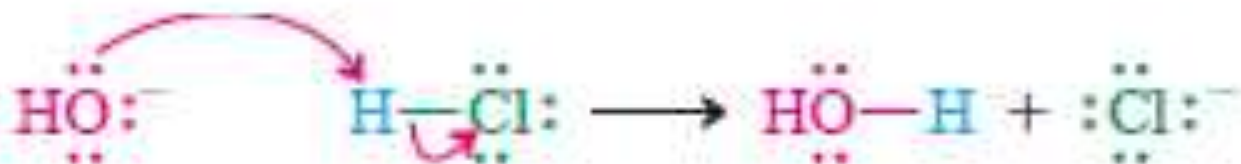
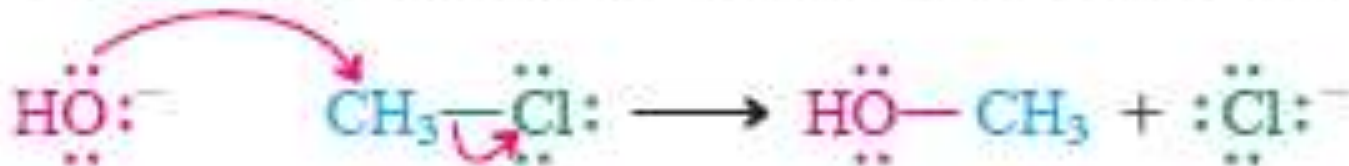


Elektrofili i nukleofili reaguju pomeranjem elektronskih parova

Reakcija natrijum-hidroksida i hlormetana



Prelazak elektrona prikazan krivim strelicama



Funkcionalne grupe: centri reaktivnosti

- Ugljenikovi atomi vezani dvostrukim i trostrukim vezama
- Ugljenik vezan za druge elemente: X, O, N, S, P,
- Funkcionalne grupe određuju reaktivnost celokupnog molekula

Funkcionalne grupe: centri reaktivnosti

- Alkani nemaju funkcionalne grupe: nepolarni i nereaktivni
- Alkeni, alkini, aromati: ugljovodonici koji sadrže funkcionalne grupe
- Funkcionalne grupe sa polarnim vezama: C-X; C-O; C=O; C-N; C-S
- Alkil-grupe: deo molekula koji se dobije uklanjanjem jednog H iz alkana

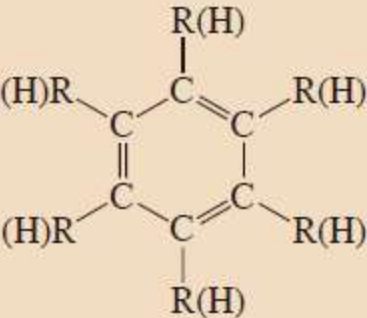

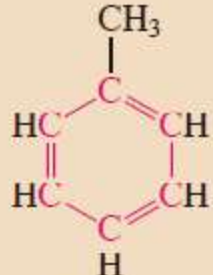
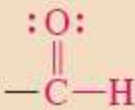


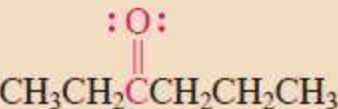
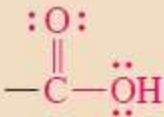
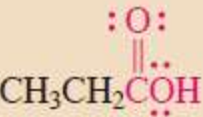
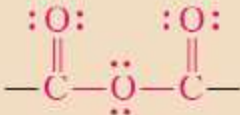

TABELA 2-3

Uobičajene funkcionalne grupe

| Klasa jedinjenja | Opšta formula ^a | Funkcionalna grupa | Primer |
|------------------|--|---|---|
| alkani | $R-H$ | None | $CH_3CH_2CH_2CH_3$ butan |
| halogenalkani | $R-\ddot{X}:$ (X = F, Cl, Br, I) | $-\ddot{X}:$ | $CH_3CH_2-\ddot{Br}:$ brometan |
| alkoholi | $R-\ddot{O}H$ | $-\ddot{O}H$ | $\begin{array}{c} H \\ \\ (CH_3)_2C-\ddot{O}H \end{array}$ 2-propanol (izopropil-alkohol) |
| etri | $R-\ddot{O}-R'$ | $-\ddot{O}-$ | $CH_3CH_2-\ddot{O}-CH_3$ metoksietan (etil-metil-etar) |
| tioli | $R-\ddot{S}H$ | $-\ddot{S}H$ | $CH_3CH_2-\ddot{S}H$ etantiol |
| alkeni | $\begin{array}{c} (H)R \quad R(H) \\ \diagdown \quad / \\ C=C \\ / \quad \diagdown \\ (H)R \quad R(H) \end{array}$ | $\diagdown \quad \diagup \\ C=C \\ \diagup \quad \diagdown$ | $\begin{array}{c} CH_3 \\ \diagdown \\ C=CH_2 \\ / \\ CH_3 \end{array}$ 2-metilpropen |
| alkini | $(H)R-C\equiv C-R(H)$ | $-C\equiv C-$ | $CH_3C\equiv CCH_3$ 2-butin |

TABELA 2-3

Uobičajene funkcionalne grupe (nastavak)

| Klasa jedinjenja | Opšta formula ^a | Funkcionalna grupa | Primer |
|-----------------------|---|---|---|
| aromatična jedinjenja |  |  |  <p>metilbenzen (toluen)</p> |
| aldehidi | $\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\text{H} \end{array}$ |  |  <p>CH₃CH₂CH=O propanal</p> |
| ketoni | $\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\text{R}' \end{array}$ |  |  <p>CH₃CH₂C(=O)CH₂CH₂CH₃ 3-heksanon</p> |
| karboksilne kiseline | $\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\ddot{\text{O}}-\text{H} \end{array}$ |  |  <p>CH₃CH₂COOH propanska kiselina</p> |
| anhidridi | $\begin{array}{c} \text{:O:} \quad \text{:O:} \\ \parallel \quad \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\ddot{\text{O}}-\text{C}-\text{R}'(\text{H}) \end{array}$ |  |  <p>CH₃CH₂COOCC(=O)CH₂CH₃ propanoanhidrid</p> |

^aSlovo R označava alkil-grupu (vidi tekst). Alkil-grupe se mogu razlikovati označavanjem R, R', R'' itd.

TABELA 2-3

Uobičajene funkcionalne grupe (nastavak)

| Klasa jedinjenja | Opšta formula ^a | Funkcionalna grupa | Primer |
|------------------|--|---|--|
| estri | $\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \parallel \\ (\text{H})\text{R}-\text{C}-\ddot{\text{O}}-\text{R}' \end{array}$ | $\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \parallel \\ -\text{C}-\ddot{\text{O}}- \end{array}$ | $\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \parallel \\ \text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}-\ddot{\text{O}}-\text{CH}_3 \\ \text{metil-propanoat} \\ \text{(metil-propionat)} \end{array}$ |
| amidi | $\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C}-\ddot{\text{N}}-\text{R}'(\text{H}) \\ \\ \text{R}''(\text{H}) \end{array}$ | $\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \parallel \\ -\text{C}-\ddot{\text{N}}- \\ \end{array}$ | $\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \parallel \\ \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}-\ddot{\text{N}}\text{H}_2 \\ \text{butanamid} \end{array}$ |
| nitrili | $\text{R}-\text{C}\equiv\text{N:}$ | $-\text{C}\equiv\text{N:}$ | $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{N:}$ etanonitril (acetonitril) |
| amini | $\begin{array}{c} \ddot{\text{N}} \\ \\ \text{R}-\text{N}-\text{R}'(\text{H}) \\ \\ \text{R}''(\text{H}) \end{array}$ | $-\ddot{\text{N}}\langle$ | $(\text{CH}_3)_3\text{N:}$ <i>N,N</i> -dimetilmetanamin (trimetilamin) |

Alkani

$$1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ cm}$$

Ugljovodonici bez funkcionalnih grupa

Alkani ravnog niza: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$

veza-crta:

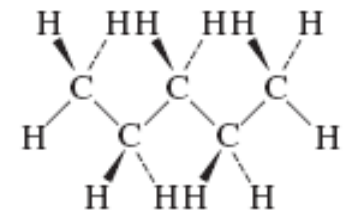
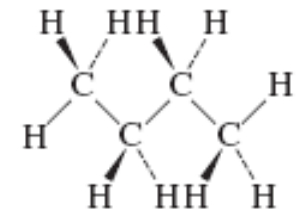
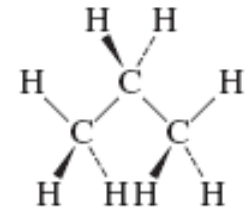
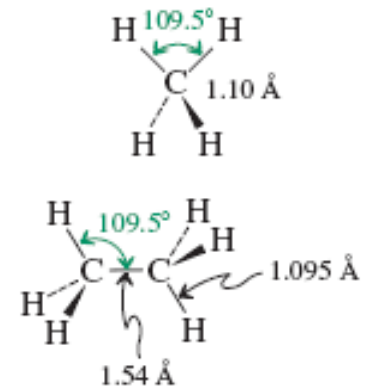


butan

Račvastosti: $\text{CH}_3 - \text{C} - \text{CH}_3$



2-metilpropan





Ista molekulska formula, različito povezivanje



Cikloheksan C_6H_{12}



Biciklo[2.2.2]oktan C_8H_{14}

Policiklični

Homologi nizovi:

ubaciti $-CH_2-$ grupu između $C-C$ veza.

Alkan ravnog niza



Empirijska formula za alkane normalnog i račvastog niza.

Ciklični alkani: C_nH_{2n}

TABELA 2-4

Broj mogućih izomernih
alkana C_nH_{2n+2}

| n | Izomeri |
|-----|---------|
| 1 | 1 |
| 2 | 1 |
| 3 | 1 |
| 4 | 2 |
| 5 | 3 |
| 6 | 5 |
| 7 | 9 |
| 8 | 18 |
| 9 | 35 |
| 10 | 75 |
| 15 | 4,347 |
| 20 | 366,319 |

Imenovanje alkana prema IUPAC pravilima

TABELA 2-5

Imena i fizičke osobine alkana normalnog niza, C_nH_{2n+2}

| <i>n</i> | Ime | Formula | Tačka ključanja (°C) | Tačka topljenja (°C) | Gustina na 20°C (g ml ⁻¹) | |
|----------|------------|--|----------------------|----------------------|---------------------------------------|-------------|
| 1 | metan | CH ₄ | -161.7 | -182.5 | 0.466 | (na -164°C) |
| 2 | etan | CH ₃ CH ₃ | -88.6 | -183.3 | 0.572 | (na -100°C) |
| 3 | propan | CH ₃ CH ₂ CH ₃ | -42.1 | -187.7 | 0.5853 | (na -45°C) |
| 4 | butan | CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₃ | -0.5 | -138.3 | 0.5787 | |
| 5 | pentan | CH ₃ (CH ₂) ₃ CH ₃ | 36.1 | -129.8 | 0.6262 | |
| 6 | heksan | CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃ | 68.7 | -95.3 | 0.6603 | |
| 7 | heptan | CH ₃ (CH ₂) ₅ CH ₃ | 98.4 | -90.6 | 0.6837 | |
| 8 | oktan | CH ₃ (CH ₂) ₆ CH ₃ | 125.7 | -56.8 | 0.7026 | |
| 9 | nonan | CH ₃ (CH ₂) ₇ CH ₃ | 150.8 | -53.5 | 0.7177 | |
| 10 | dekan | CH ₃ (CH ₂) ₈ CH ₃ | 174.0 | -29.7 | 0.7299 | |
| 11 | undekan | CH ₃ (CH ₂) ₉ CH ₃ | 195.8 | -25.6 | 0.7402 | |
| 12 | dodekan | CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CH ₃ | 216.3 | -9.6 | 0.7487 | |
| 13 | tridekan | CH ₃ (CH ₂) ₁₁ CH ₃ | 235.4 | -5.5 | 0.7564 | |
| 14 | tetradekan | CH ₃ (CH ₂) ₁₂ CH ₃ | 253.7 | 5.9 | 0.7628 | |
| 15 | pentadekan | CH ₃ (CH ₂) ₁₃ CH ₃ | 270.6 | 10 | 0.7685 | |
| 16 | heksadekan | CH ₃ (CH ₂) ₁₄ CH ₃ | 287 | 18.2 | 0.7733 | |
| 17 | heptadekan | CH ₃ (CH ₂) ₁₅ CH ₃ | 301.8 | 22 | 0.7780 | |
| 18 | oktadekan | CH ₃ (CH ₂) ₁₆ CH ₃ | 316.1 | 28.2 | 0.7768 | |
| 19 | nonadekan | CH ₃ (CH ₂) ₁₇ CH ₃ | 329.7 | 32.1 | 0.7855 | |
| 20 | eikozan | CH ₃ (CH ₂) ₁₈ CH ₃ | 343 | 36.8 | 0.7886 | |

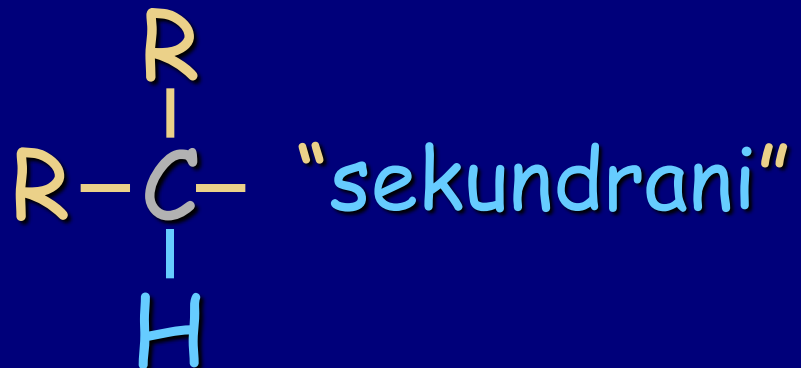
Imenovanje alkil-supstituenata

Zamena nastavka **-an** nastavkom **-il**

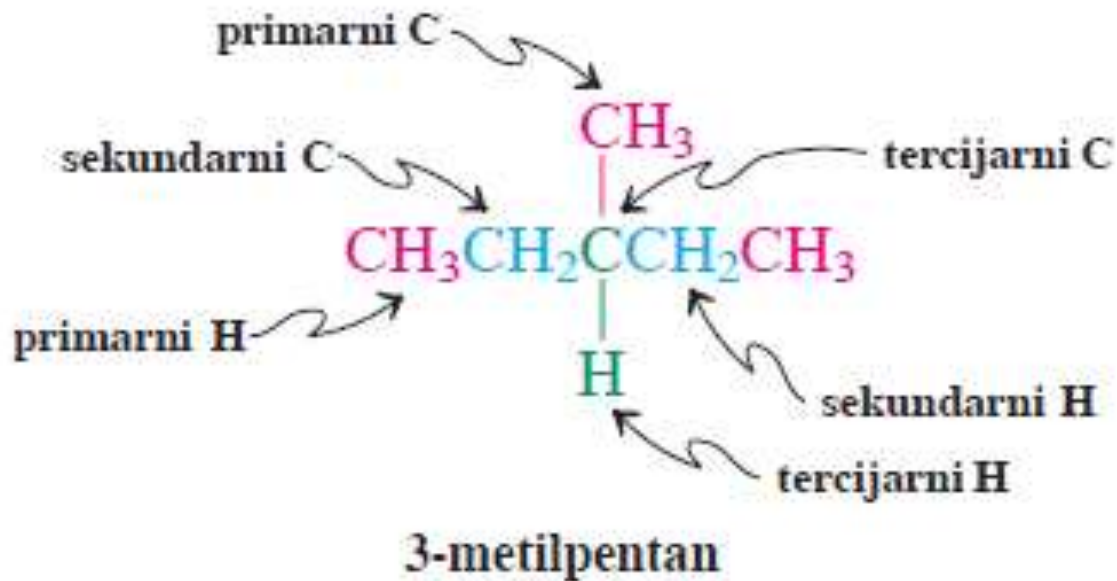
met**an** / met**il**, heks**an** / heks**il**

Skraćeno prikazivanje: alkan **R-H** / alkil **R-**

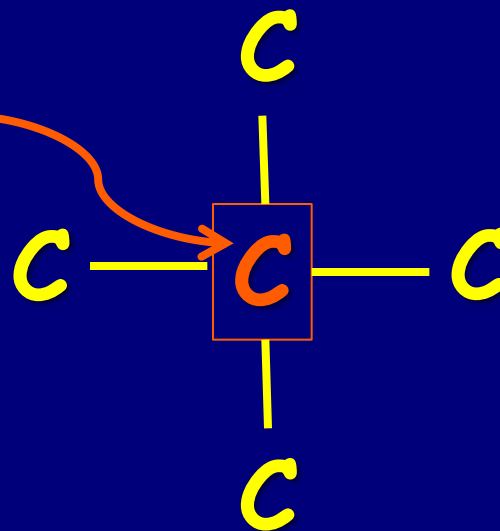
RCH₂- "primarni"



Primarni, sekundarni i tercijarni atomi ugljenika i vodonika

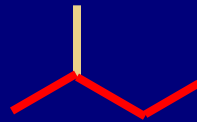
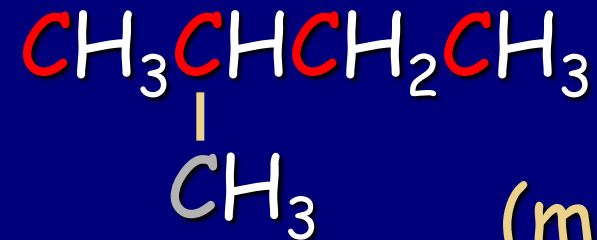


kvaternerni
ugljenik



IUPAC pravila

1. Nađite i imenujte najduži **niz** u molekulu



(metil-supstituisani) **butan**

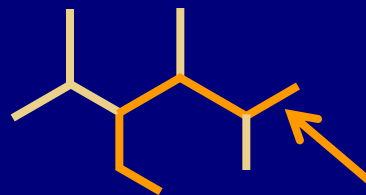


oktan (supstituisan sa jednom etil i dve metil-grupe)

Kada postoje dva niza jednake dužine bira se niz sa više supstituenata



4 supstituenta



3 supstituenta

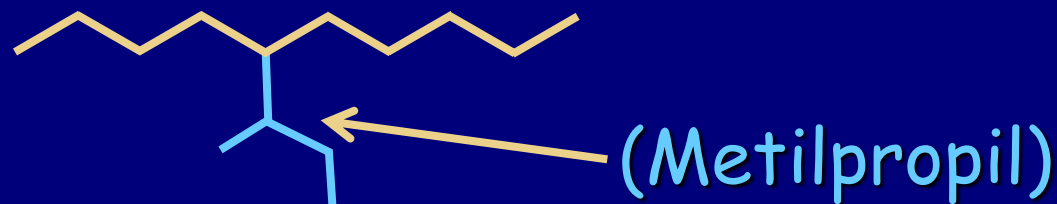
2. Sve grupe vezane za najduži niz imenujte kao alkil-supstituent

a. Imena alkil grupa ravnog niza R: metil, etil, propil...

b. Za račvaste supstituent primenjuju se IUPAC pravila kao i za osnovni niz:

a'. Pronaći najduži niz (početi od mesta vezivanja za osnovni niz) b'. Imenovati supstituent

primer:



Račvaste alkil-grupe

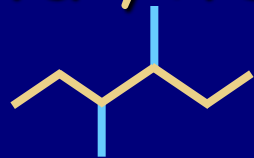
TABELA 2-6

Račvaste alkil-grupe

| Struktura | Uobičajeno ime | Primer uobičajenog imena u primeni | Sistematsko ime | Oznaka |
|---|----------------|---|-------------------|------------|
| $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \\ \\ \text{H} \end{array}$ | izopropil | $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \text{Cl} \text{ (izopropil hlorid)} \\ \\ \text{H} \end{array}$ | 1-metiletil | sekundarna |
| $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \text{CH}_2 - \\ \\ \text{H} \end{array}$ | izobutil | $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \text{CH}_3 \text{ (izobutan)} \\ \\ \text{H} \end{array}$ | 2-metilpropil | primarna |
| $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{C} - \\ \\ \text{H} \end{array}$ | sek-butil | $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{C} - \text{NH}_2 \text{ (sek-butil-amin)} \\ \\ \text{H} \end{array}$ | 1-metilpropil | sekundarna |
| $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ | terc-butil | $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \text{Br} \text{ (terc-butil-bromid)} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ | 1,1-dimetiletil | tercijarna |
| $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \text{CH}_2 - \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ | neopentil | $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \text{CH}_2 - \text{OH} \text{ (neopentil-alkohol)} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ | 2,2-dimetilpropil | primarna |

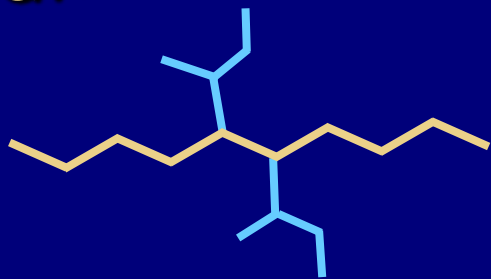
c. Ukoliko molekul sadrži više istih supstituenata:

za **R = ravan niz**, koriste se prefiksi di-, tri-, tetra-, penta-, itd.:



Dimetilheksan

za **R = račvast**, koriste se prefiksi: bis-, tris-, tetrakis-, itd., i odgovarajuće alkil ime u zagradi:



Bis(metilpropil)

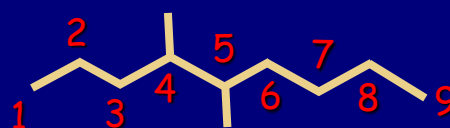
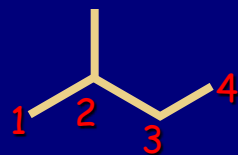
d. Uobičajeni nazivi za račvaste supstituente: izopropil, sek-butil, terc-butil, neopentil

TABELA 2-6

Račvaste alkil-grupe

| Struktura | Uobičajeno ime | Primer uobičajenog imena u primeni | Sistematsko ime | Oznaka |
|---|----------------|---|-------------------|------------|
| $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \\ \\ \text{H} \end{array}$ | izopropil | $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \text{Cl} \text{ (izopropil hlorid)} \\ \\ \text{H} \end{array}$ | 1-metiletil | sekundarna |
| $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \text{CH}_2 - \\ \\ \text{H} \end{array}$ | izobutil | $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \text{CH}_3 \text{ (izobutan)} \\ \\ \text{H} \end{array}$ | 2-metilpropil | primarna |
| $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{C} - \\ \\ \text{H} \end{array}$ | sek-butil | $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{C} - \text{NH}_2 \text{ (sek-butil-amin)} \\ \\ \text{H} \end{array}$ | 1-metilpropil | sekundarna |
| $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ | terc-butil | $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \text{Br} \text{ (terc-butil-bromid)} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ | 1,1-dimetiletil | tercijarna |
| $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \text{CH}_2 - \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ | neopentil | $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \text{CH}_2 - \text{OH} \text{ (neopentil-alkohol)} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ | 2,2-dimetilpropil | primarna |

3. Numerisanje od kraja bližeg mestu suspsitucije:

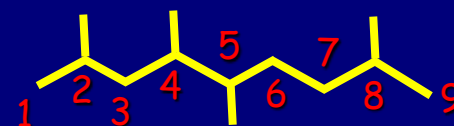


Ukoliko se dva supstituenta nalaze na istom rastojanju od krajeva niza, osnovni niz numerišite prema abecednom redu. Supstituent koji je prvi prema abecednom redu vezuje se za ugljenik nižeg broja

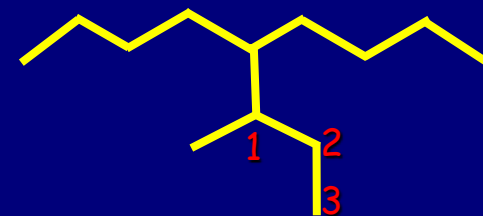


etil pre metil

Kada postoji više supstituenata ide se do mesta prvog razlikovanja:



Račvasti supstituenti: numerisanje od mesta vezivanja za niz:

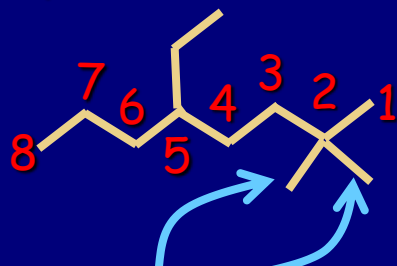


4. Napišite ime alkana prvo uređujuću supstituente prema abecednom redu (svakome prethodi broj ugljenikovog atoma za koji je vezan i crtica) i onda dodajte ime osnovnog niza



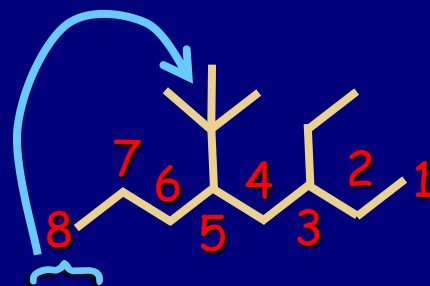
Alfabet: Di-, tri-, ..., kao i sek- i terc- ne raspoređuju se po abecednom redu, asim kada su deo složenog imena supstituenta.

5-etil-2,2-dimetiloktan



5-etil-2,2-di-metiloktan

Prefiks se ne računa



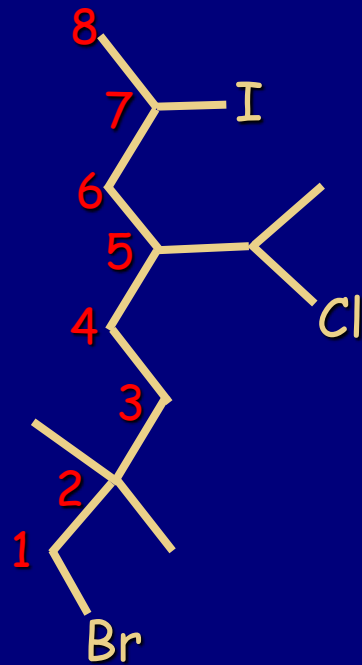
5-(1,1-Dimetiletil)-3-etiloktan

Prefiks se računa

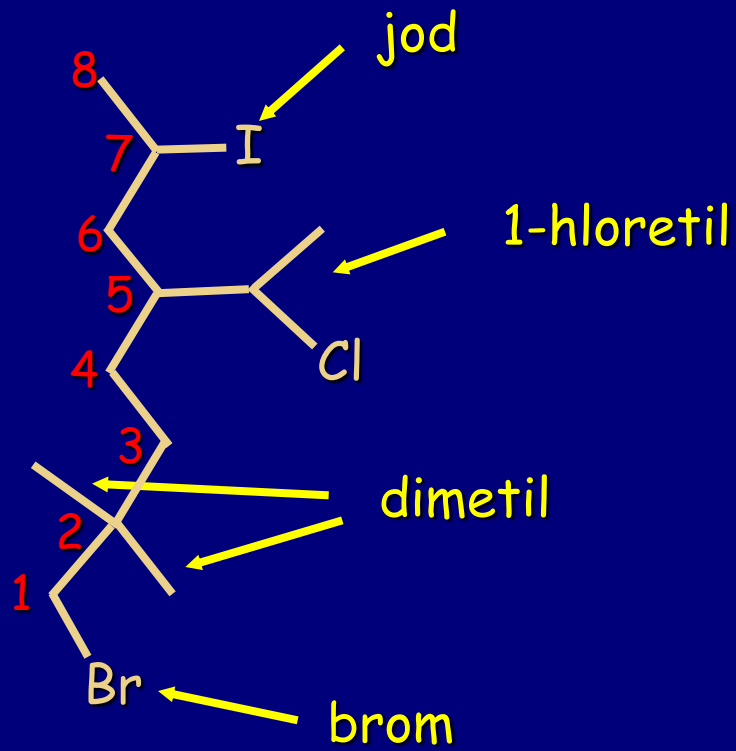
Problem:



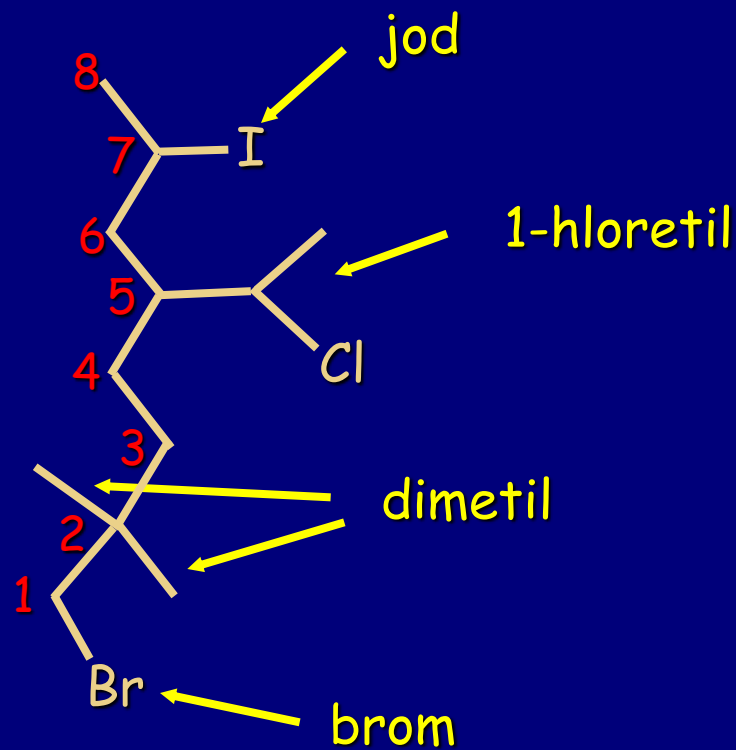
Najduži niz?



Supstituenti?

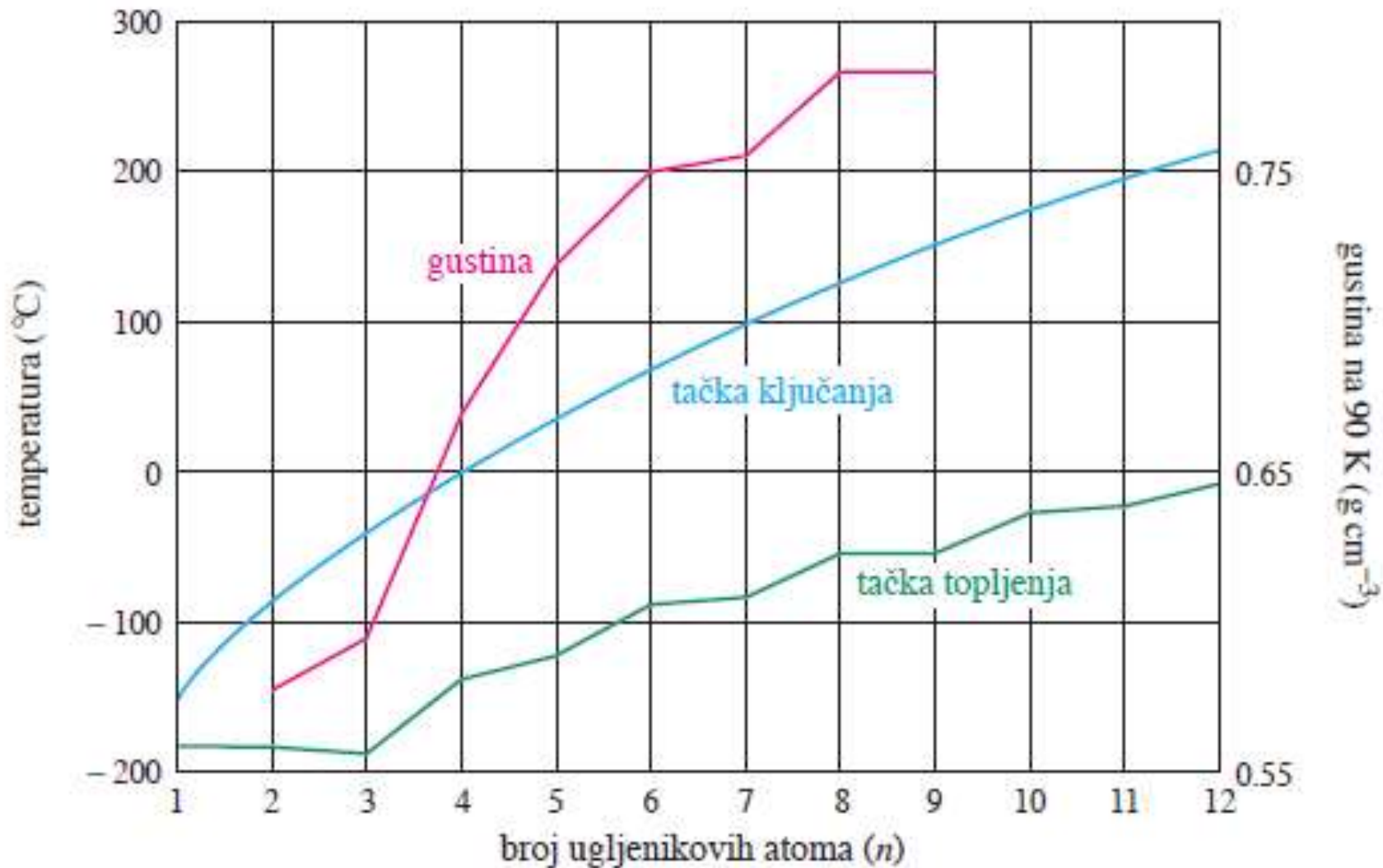


Naziv?

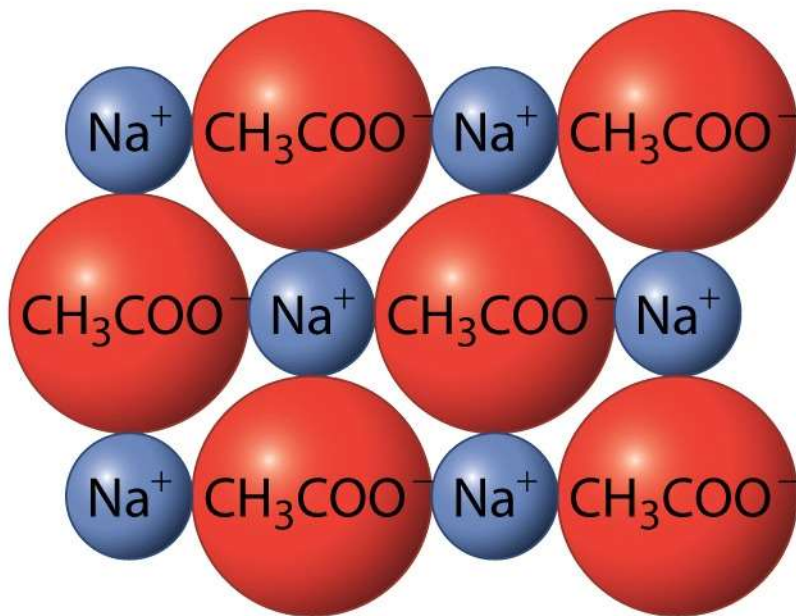


1-brom-5-(1-hloretil)-7-jod-2,2-dimetiloktan

Struktura i fizičke osobine alkana: međumolekulske sile (interakcije)

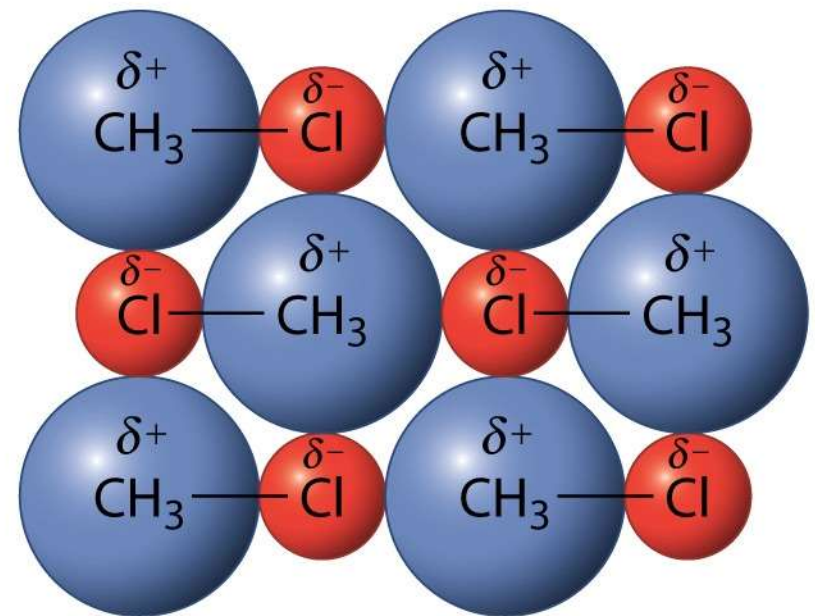


Međumolekulske sile



A

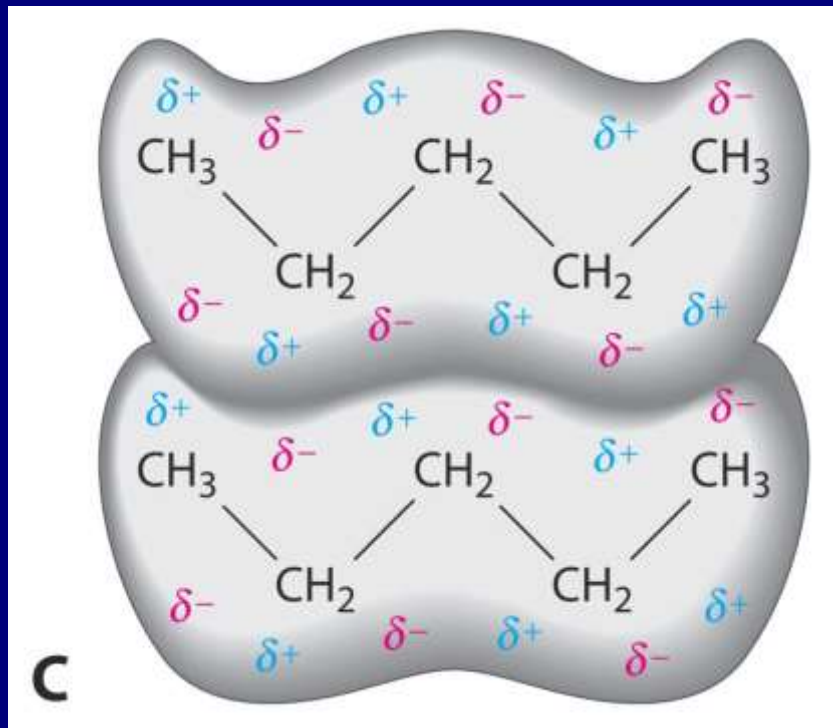
Coulomb-ove privlačne sile
u solima (jonskim jedinjenjima)



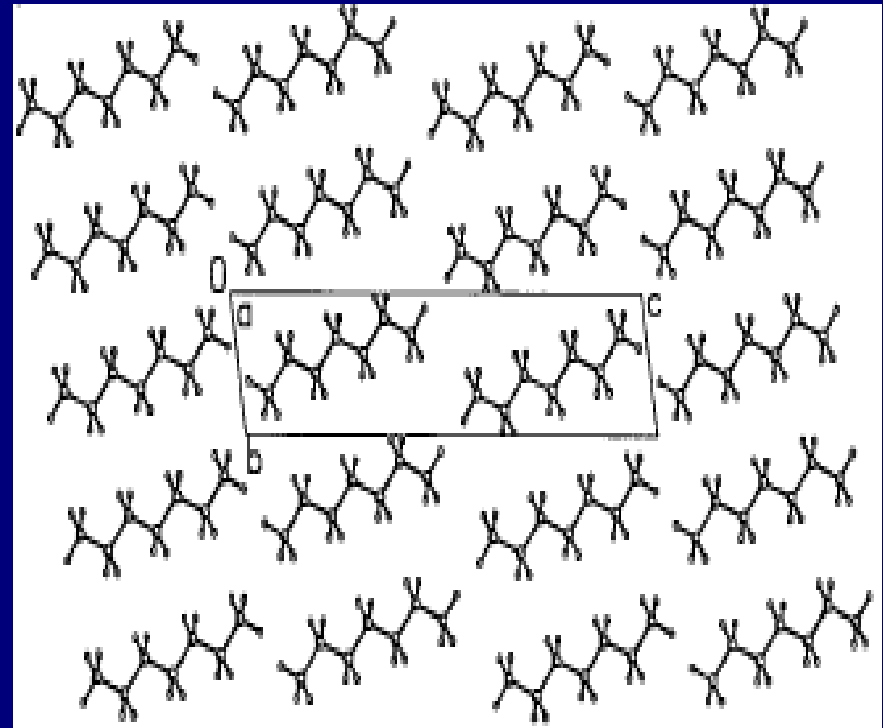
B

Dipol-dipol interakcije
u polarnim molekulima

Međumolekulske sile



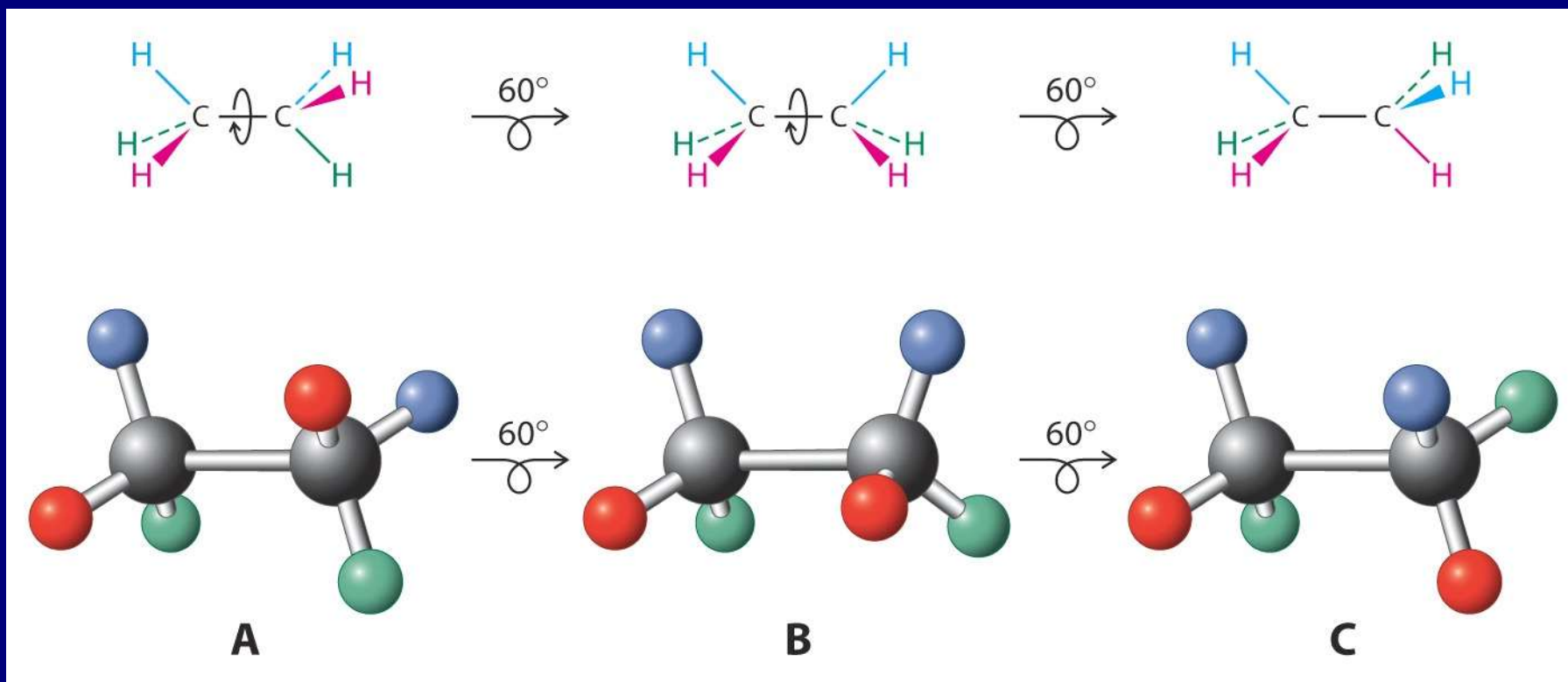
Idealizovan (pentan)



Eksperimentalno (heptan)

London-ove sile: posledica elektronske korelacije (usklađivanje kretanja elektrona, indukovanje polarizacije što dovodi do privlačenja)

Rotacija oko jednostruke veze: konformacije, rotameri etana

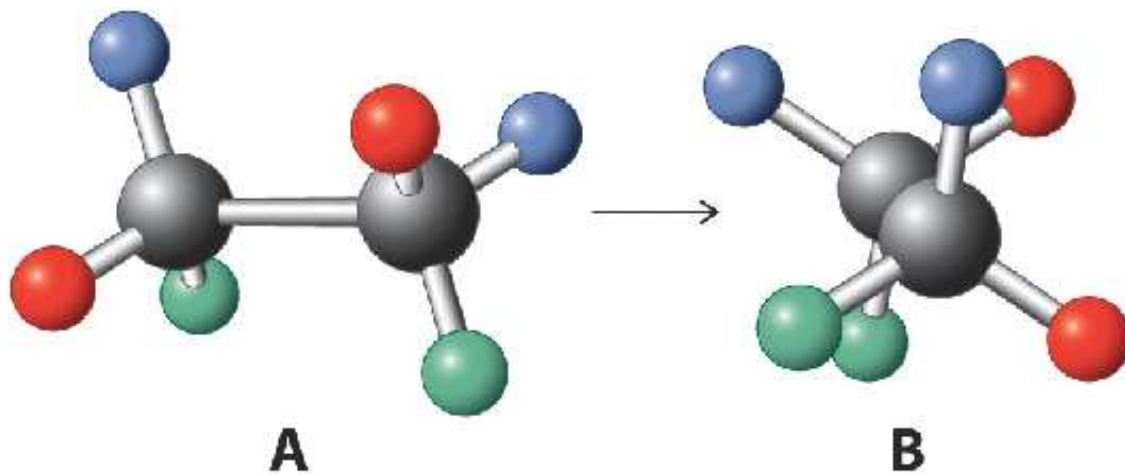
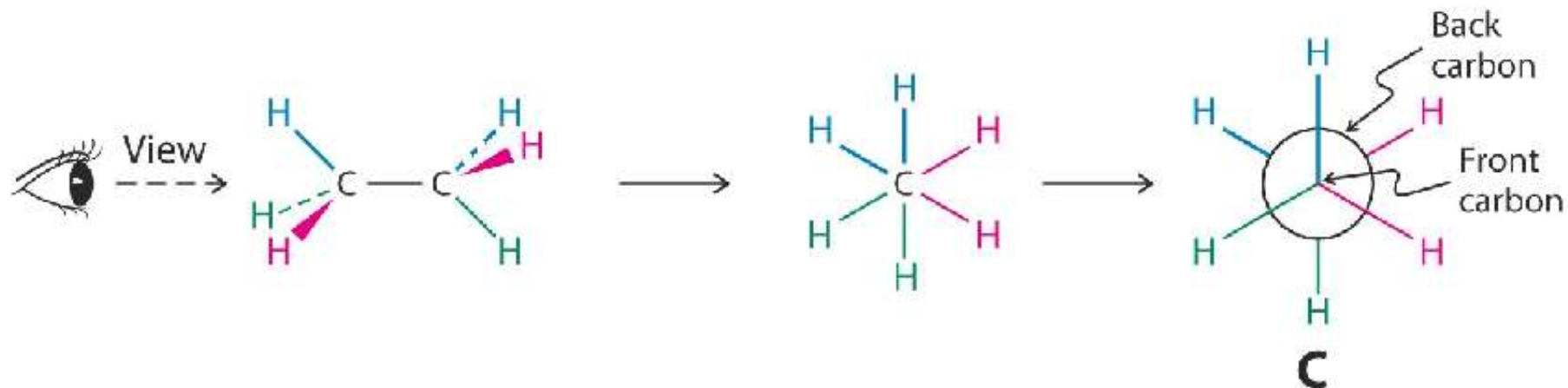


stepeničasta

eklipsna

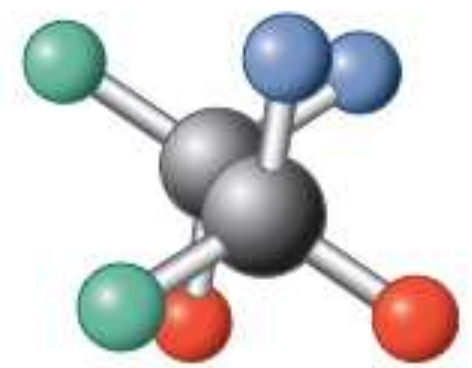
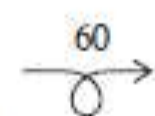
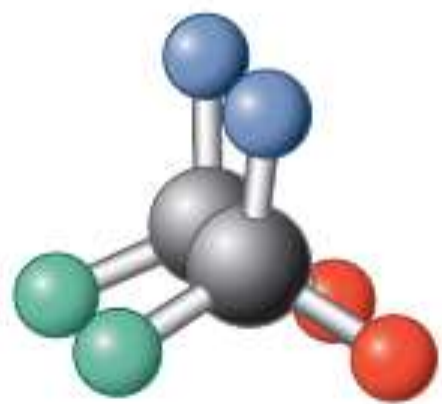
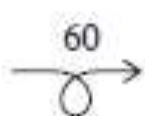
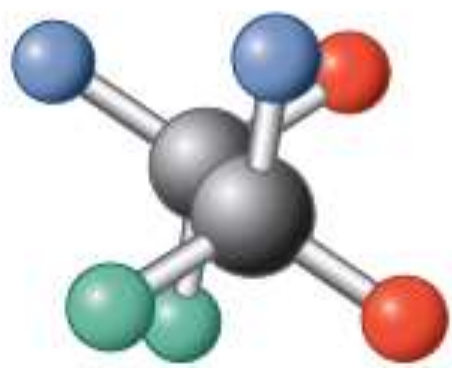
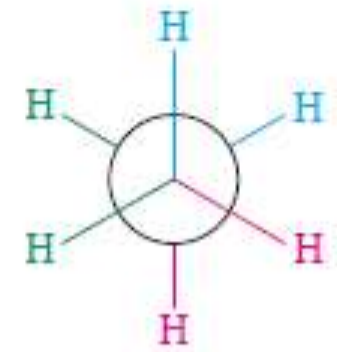
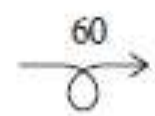
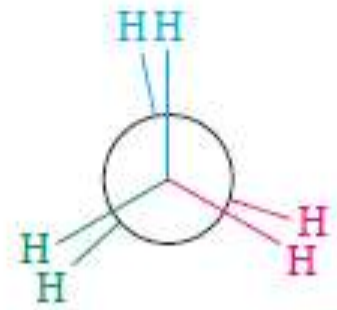
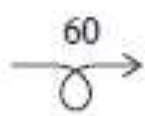
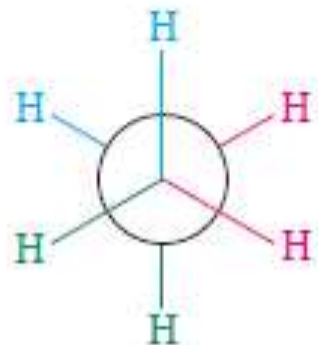
stepeničasta

Newman-ove projekcije





Rotacija sa Newman-ovim projekcijama



stepeničasta

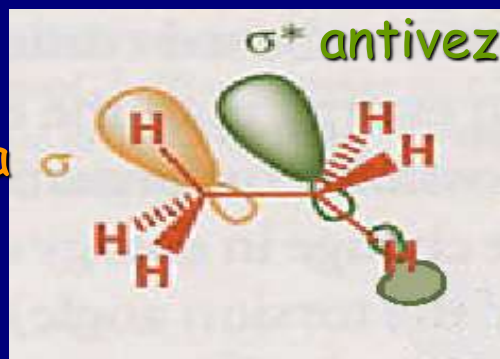
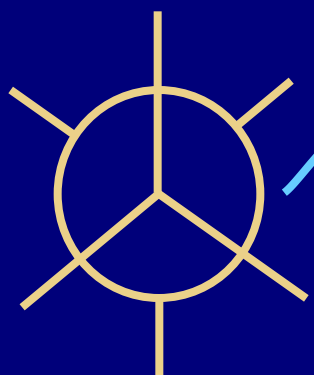
eklipsna

stepeničasta

Rotacija oko veza nije slobodna: barijere za rotaciju

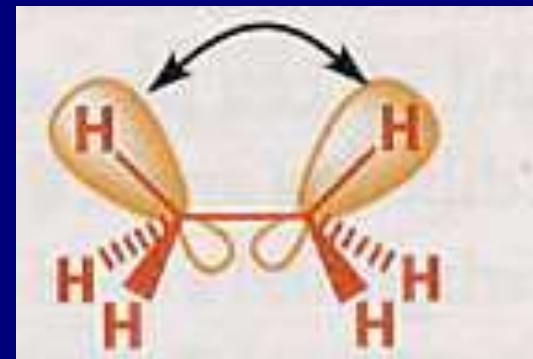
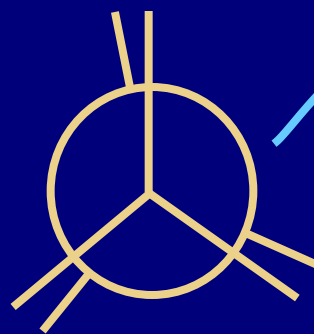
Etan ima barijeru za slobodnu rotaciju od ~ 3 kcal mol⁻¹. Barijera je posledica sternih i elektronskih efekata

Najstabiliji rotamer stepeničasti



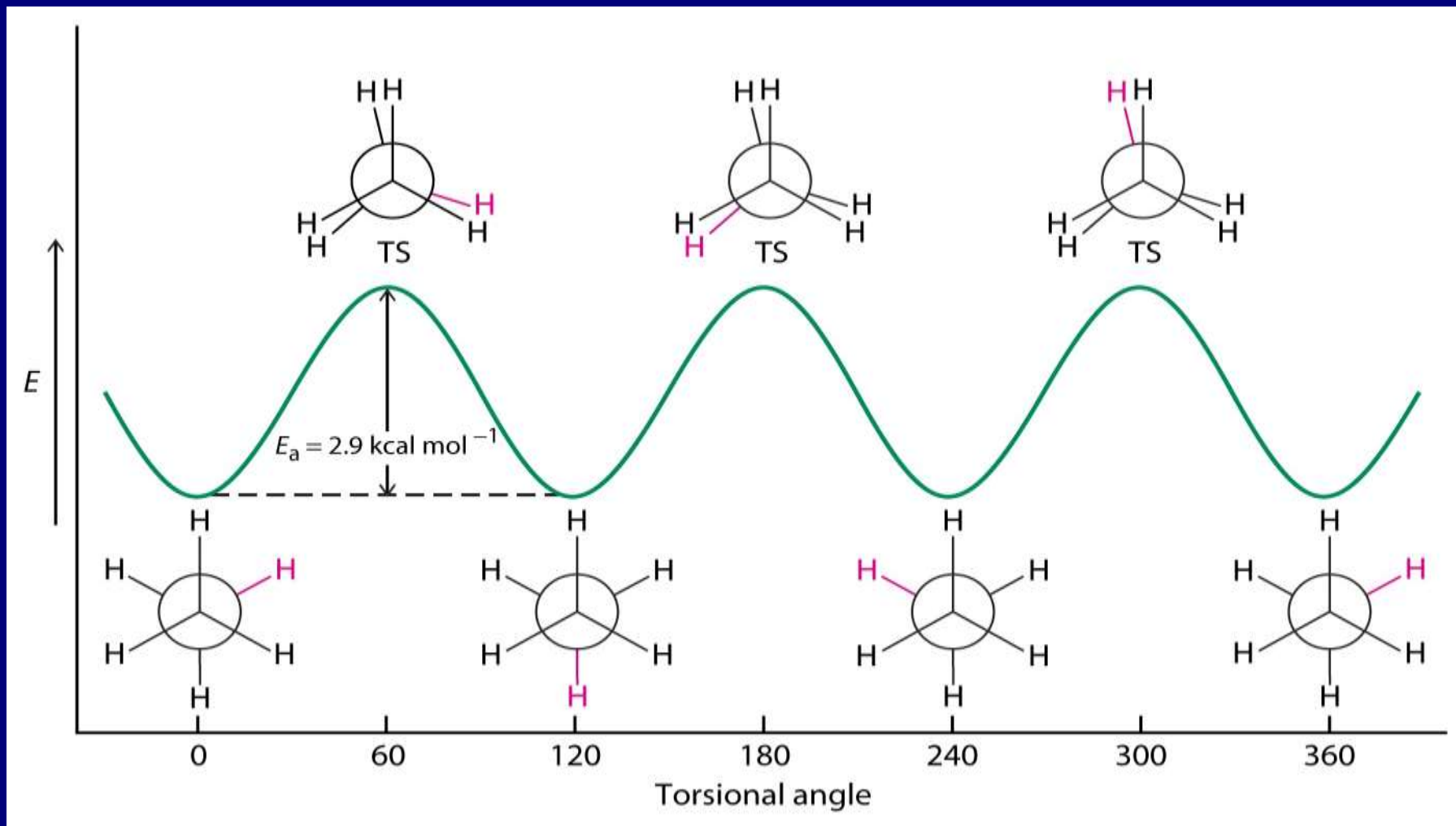
Orbitalna stabilizacija

Prelazno stanje Eklipsni rotamer

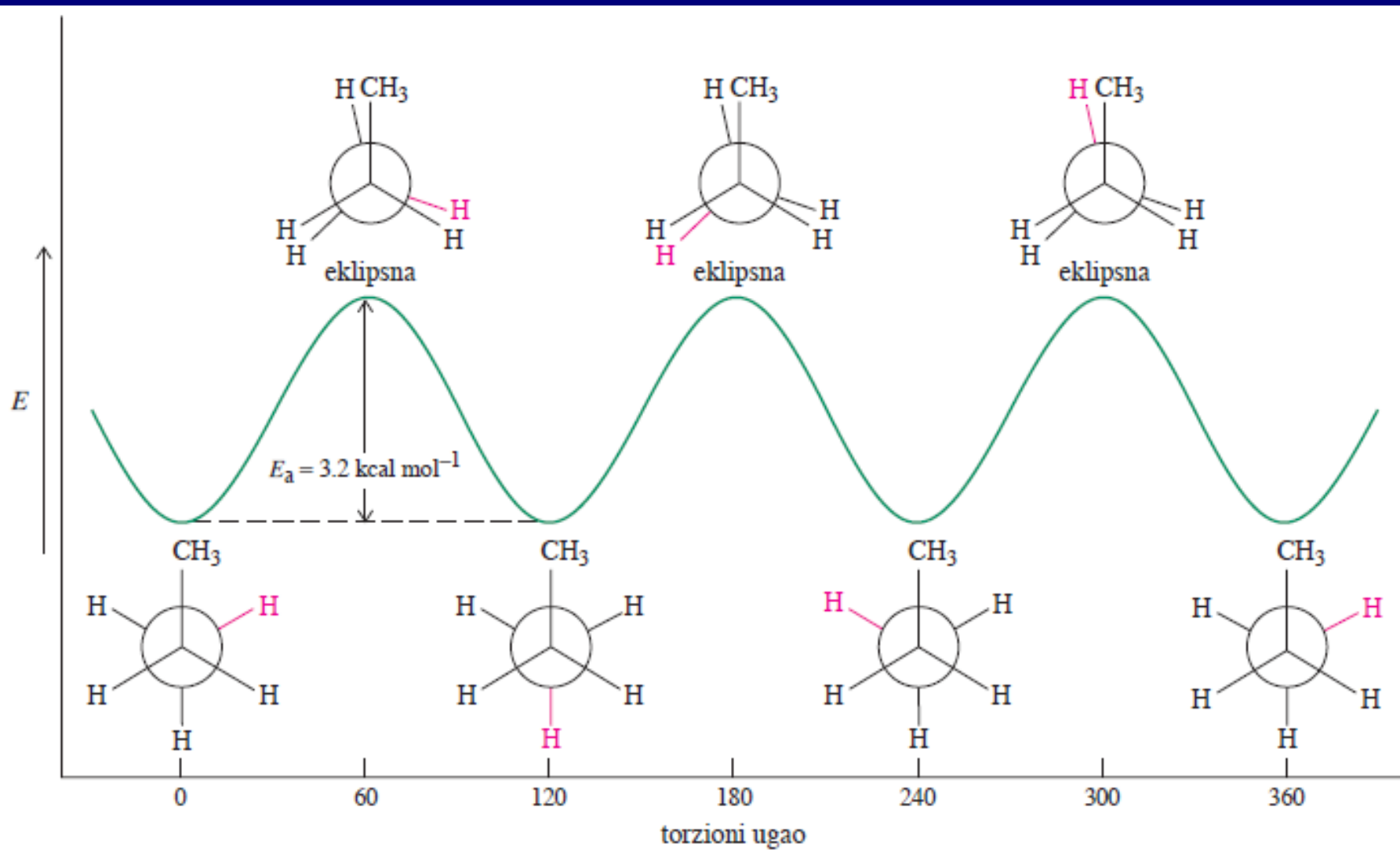


odbijanje

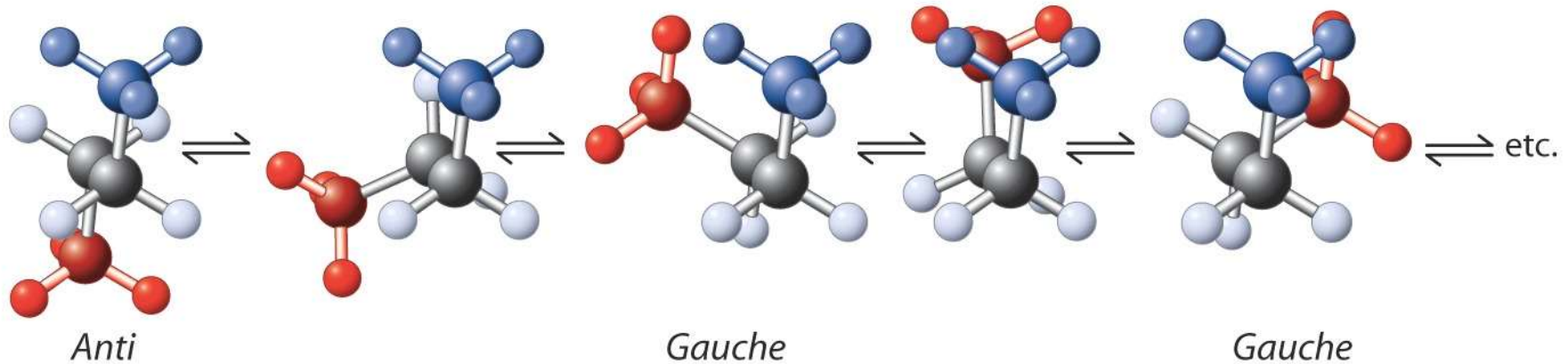
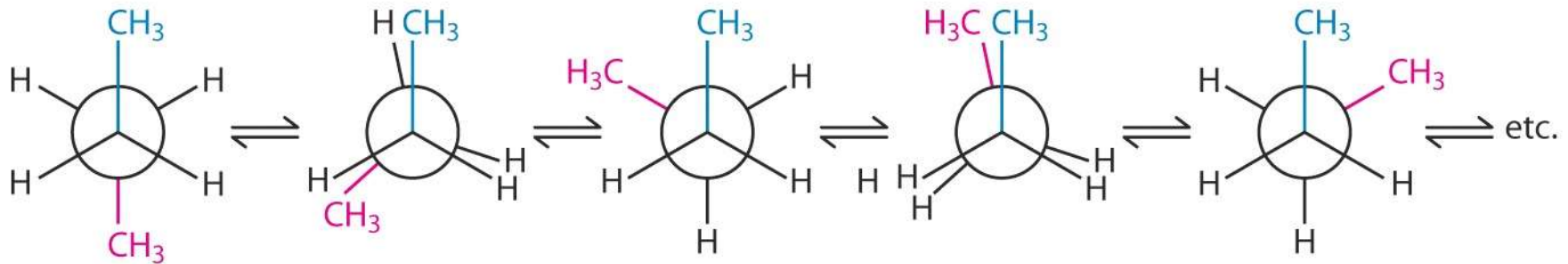
Dijagram potencijalne energije (TS = transition state-prelazno stanje)

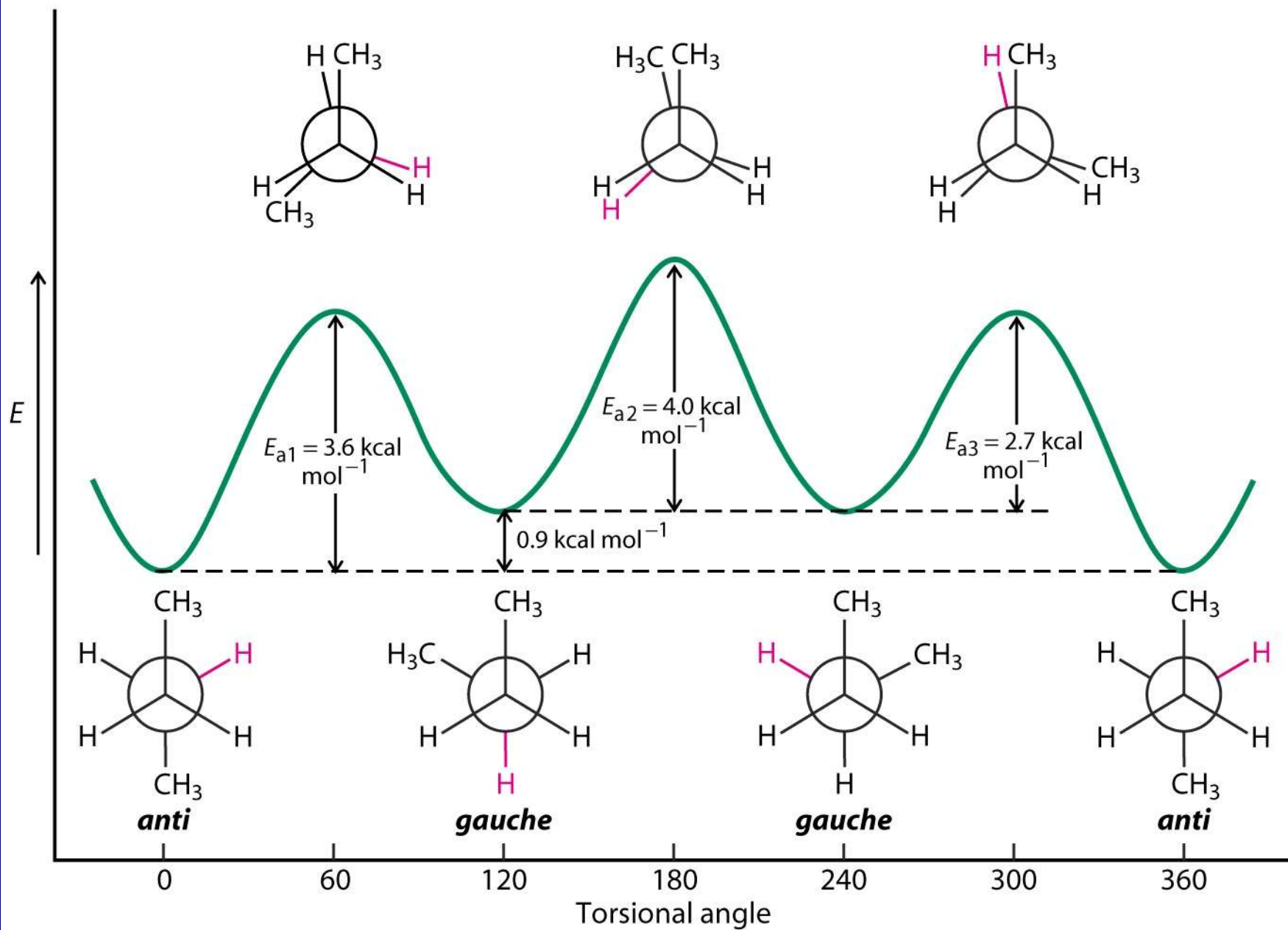


Propan: metil-grupa povećava barijeru



Butan: izomerni stepeničasti i eklipsni konformeri





Vežba 2-1

Izračunajte ΔG° prethodne reakcije na 25°C . Da li je termodinamički verovatna na 25°C ? Kakav je uticaj povećanja T na ΔG° ? Na kojoj temperaturi reakcija postaje favorizovana?

Vežba 2-2

Izračunajte ΔG° prethodne reakcije, na 25°C . Svojim rečima objasnite zašto bi reakcija u kojoj iz dva molekula postaje jedan, trebalo da ima visoku negativnu promenu entropije?

Vežba 2-4

(a) Izračunajte ΔG° na 25°C reakcije $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl} \rightarrow \text{CH}_2=\text{CH}_2 + \text{HCl}$ (reakcija reversna onoj iz vežbe 2-2). (b) Izračunajte ΔG° na 500°C iste reakcije. (Pomoć: primenite $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$ i ne zaboravite da pretvorite $^\circ\text{C}$ u kelvine.)

Vežba 2-6

Za svaku datu kiselinu napišite formule odgovarajuće konjugovane baze. (a) sumporna kiselina, H_2SO_4 ; (b) hlorna kiselina, HClO_3 ; (c) vodoniksulfid, H_2S ; (d) dimetiloksonijum-jon, $(\text{CH}_3)_2\text{OH}^+$; (e) hidrogensulfatni jon, HSO_4^- .

Vežba 2-7

Za svaku datu bazu napišite formulu odgovarajuće konjugovane kiseline. (a) dimetilamidni jon, $(\text{CH}_3)_2\text{N}^-$; (b) sulfidni jon, S^{2-} ; (c) amonijak, NH_3 ; (d) propanon (acetan), $(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{O}$; (e) 2,2,2-trifluoretoksidni jon, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{O}^-$.

Vežba 2-8

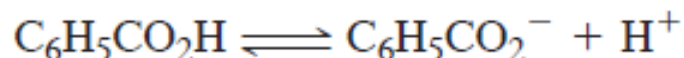
Koja kiselina je jača, azotasta (HNO_2 , $\text{p}K_a = 3,3$) ili fosforasta kiselina (H_3PO_3 , $\text{p}K_a = 1,3$)? Za svaku izračunajte K_a .

Vežba 2-9

Predložite strukturu za $\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}_2^+$. [Pomoć: pokušajte prvo da postavite proton na jedan, a zatim na drugi atom kiseonika u molekulu (CH_3COOH), i razmotrite koja od dve rezonancione strukture je više stabilizovana rezonancijom.]

Vežba 2-10

Benzoeva kiselina, $\text{C}_6\text{H}_5\text{CO}_2\text{H}$, podleže disocijaciji u vodi na 25°C prema sledećoj jednačini:



Termodinamički parametri ovog procesa su $\Delta H^\circ = -67 \text{ cal mol}^{-1}$ i $\Delta S^\circ = -19,44 \text{ cal deg}^{-1} \text{ mol}^{-1}$. Izračunajte K_a i $\text{p}K_a$ za benzoevu kiselinu. Kakva je jačina benzoeve kiseline u poređenju sa sirćetnom kiselinom, koja ima $\text{p}K_a = 4,7$?

Vežba 2-11

(a) Nacrtajte strukture pet izomernih heksana. (b) Nacrtajte strukture svih mogućih sledećih, viših i nižih, homologa 2-metilbutana.

Vežba 2-12

Nacrtajte strukture izoheksana i neopentana

Vežba 2-13

Označite primarne, sekundarne i tercijarne vodonike kod 2-metilpentana (izoheksana).

Vežba 2-15

Nacrtajte strukturu 5-butil-3-hlor-2,2,3-trimetildekana.

Vežba 2-16

Nacrtajte cik-cak klinaste strukture 2-metilbutana i 2,3-dimetilbutana.

Vežba 2-17

Nacrtajte kvalitativni dijagram potencijalne energije rotacije oko C3–C4 veze kod 2-metilpentana. Prikažite Newman-ove projekcione formule za sve konformacije koje se nalaze na maksimumu i minimumu energetskeg dijagrama. Objasnite sličnosti i razlike sa ostalim molekulima koji su prikazani u ovom odeljku.

Vežba 2-18

Nacrtajte očekivane dijagrame potencijalnih energija rotacije oko C2–C3 kod 2,3-dimetilbutana. Nacrtajte i Newman-ove projekcije svake stepeničaste i eklipsne konformacije.