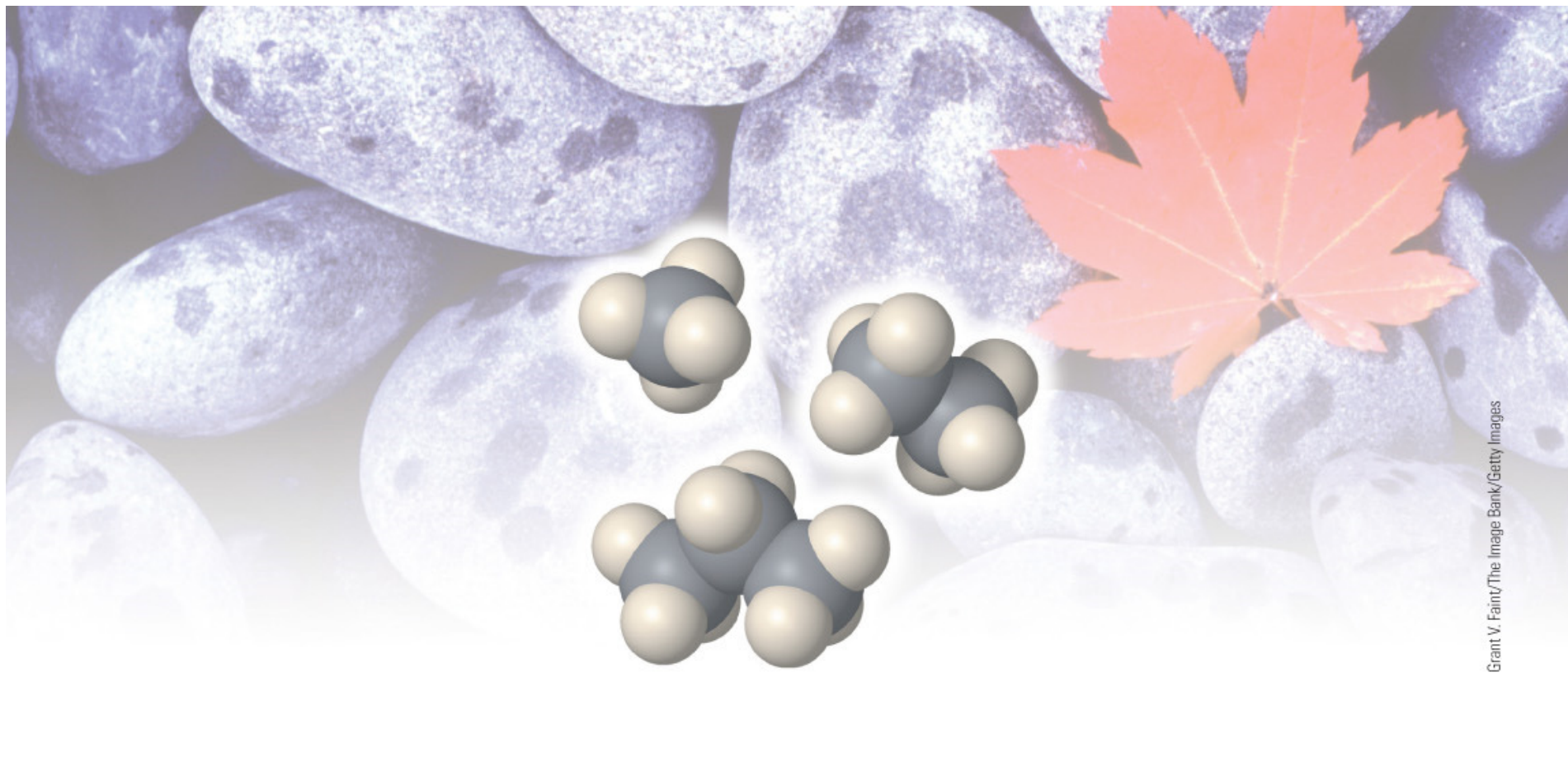
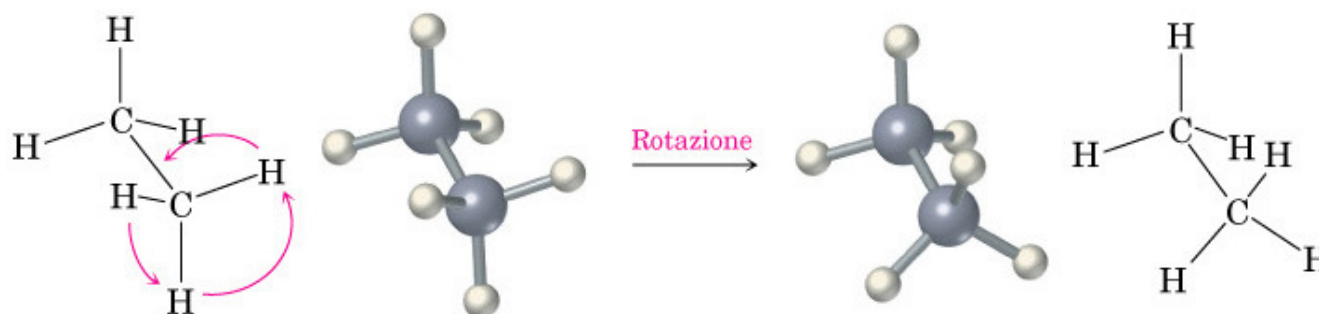


# Stereochimica di alcani e cicloalcani



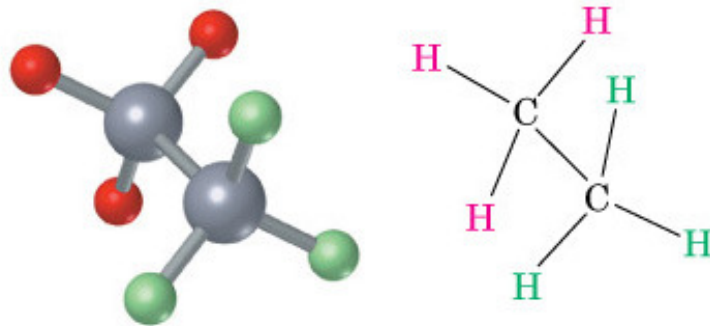
## Conformazioni, conformeri



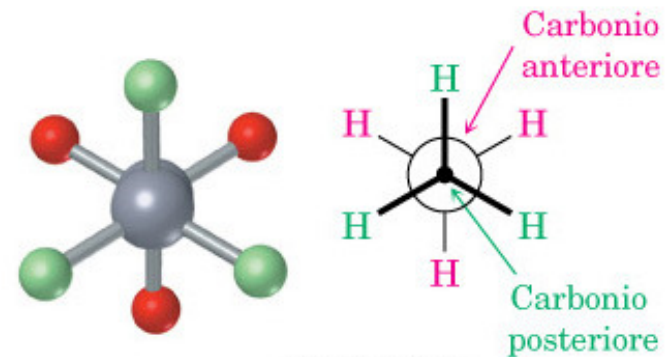
Due conformazioni dell'**etano**.

I differenti conformeri si interconvertono per rotazione attorno al legame C-C .

**Rappresentazione a cavalletto e proiezione di Newman** dell'etano. Nella rappresentazione a cavalletto la molecola è vista da un angolo obliquo, mentre nella proiezione di Newman, la molecola è vista lungo la direzione del legame carbonio-carbonio.



**Rappresentazione  
a cavalletto**



**Proiezione  
di Newman**

## Tensione torsionale

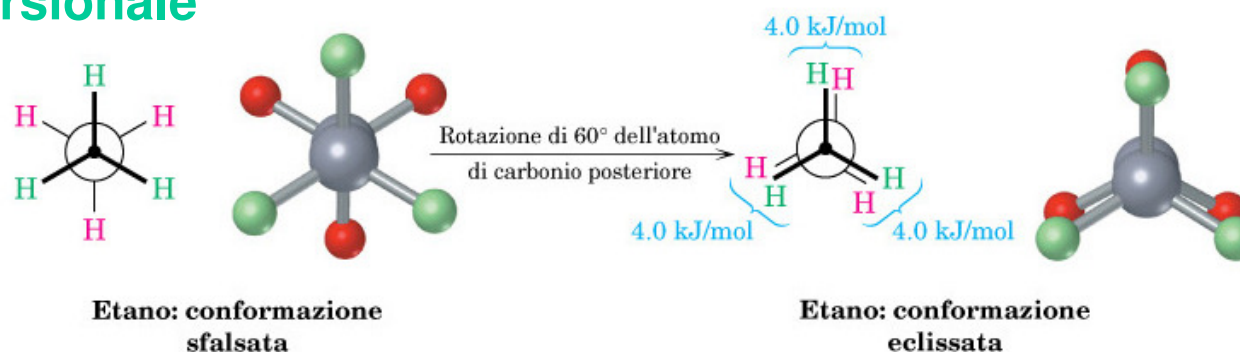
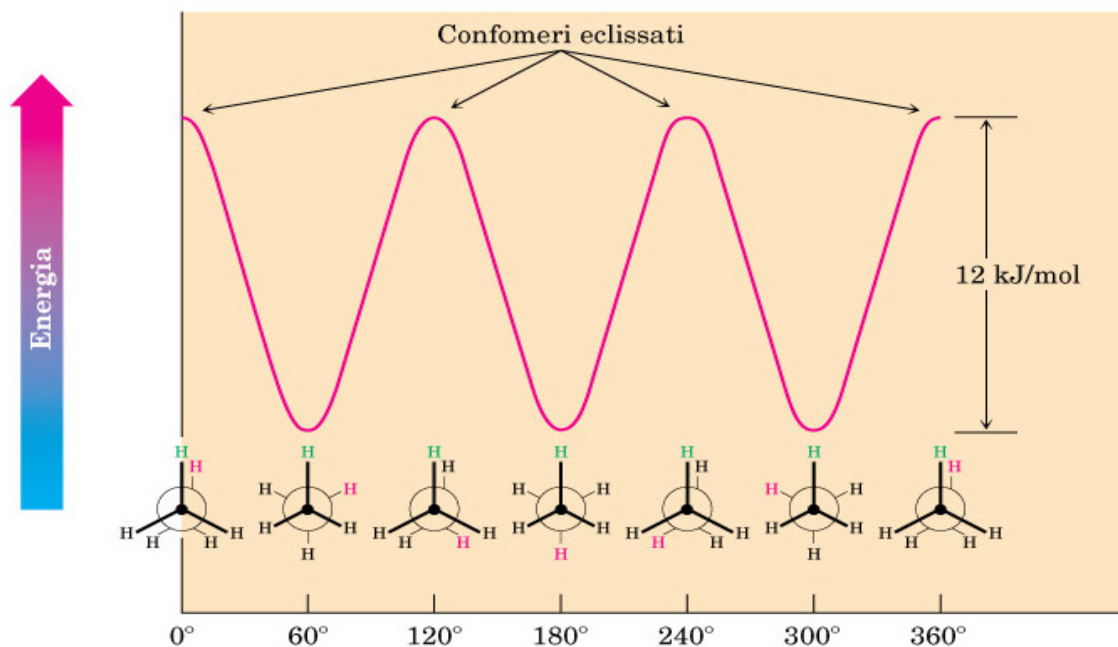
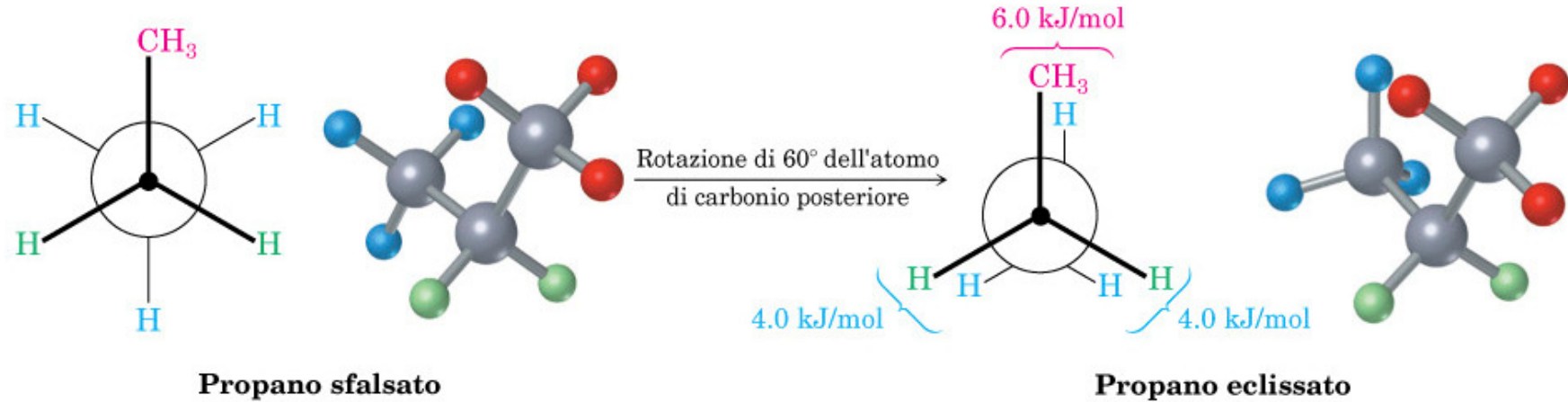


Grafico dell'energia potenziale in funzione dell'angolo diedro nell'etano. Le conformazioni sfalsate sono più stabili delle conformazioni eclissate di 12 kJ/mol.



Conformazioni sfalsate ed eclissate del **propano** in proiezione di Newman. La conformazione sfalsata è più stabile di quella eclissata di 14 kJ/mol.



butano

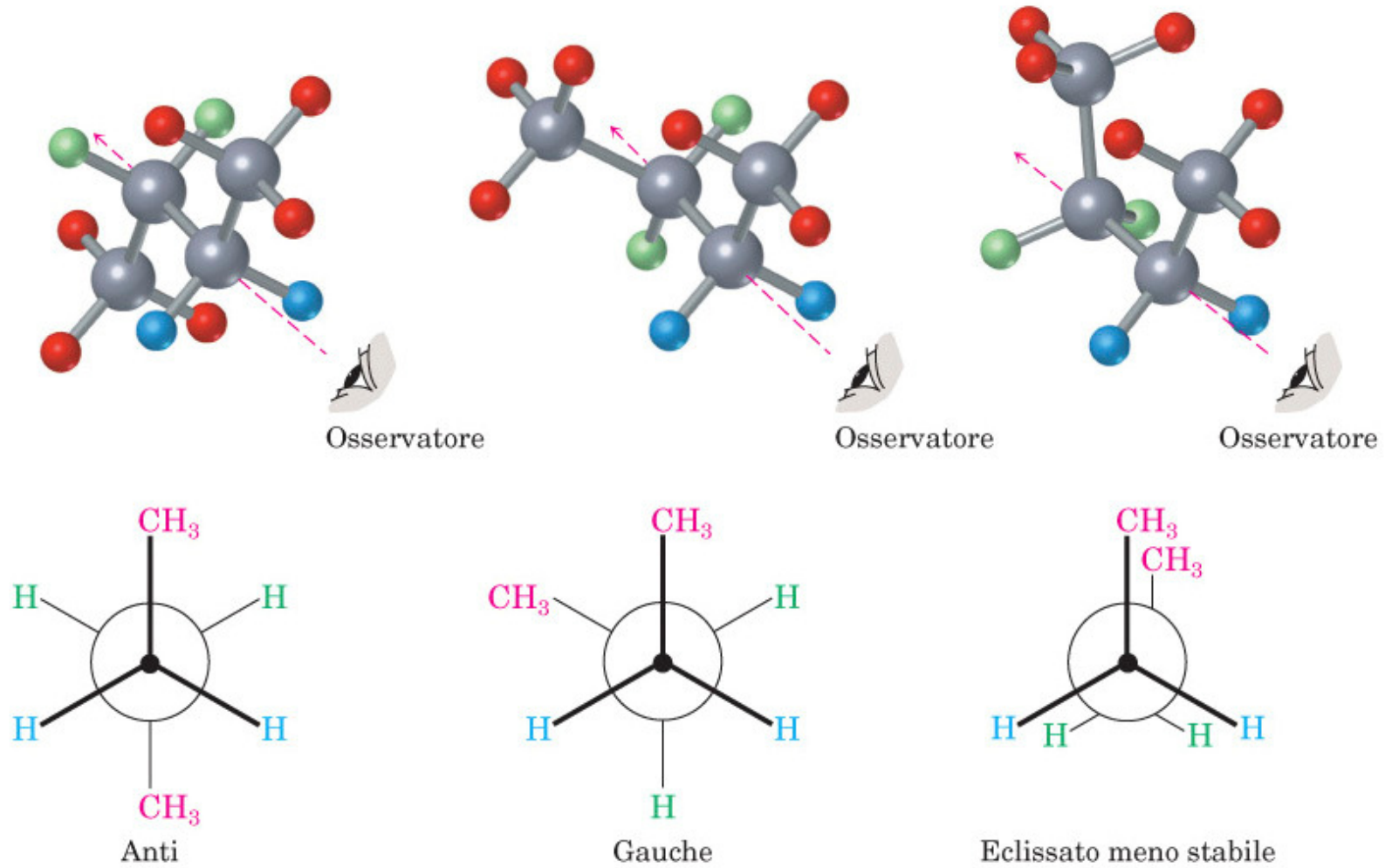
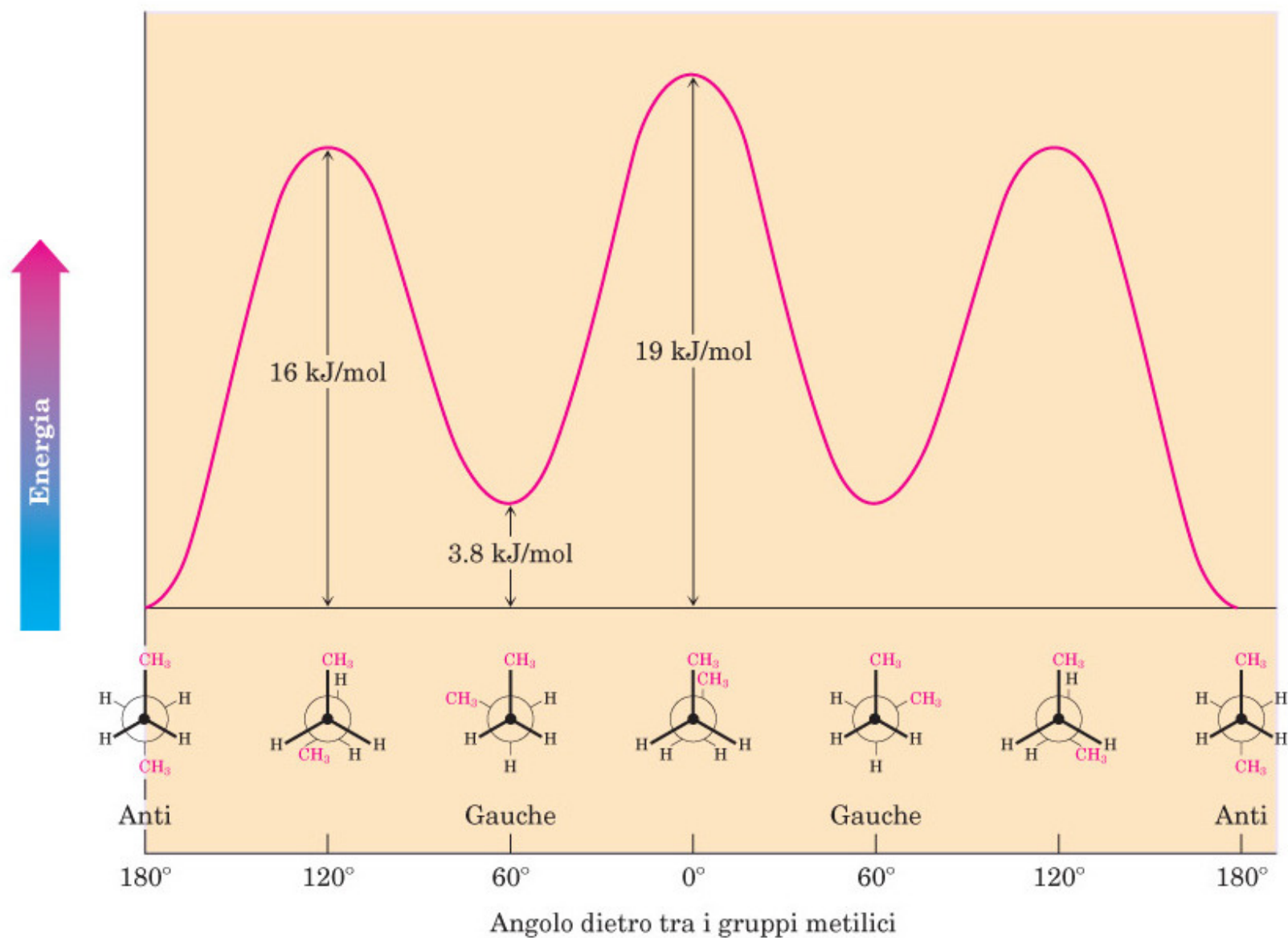
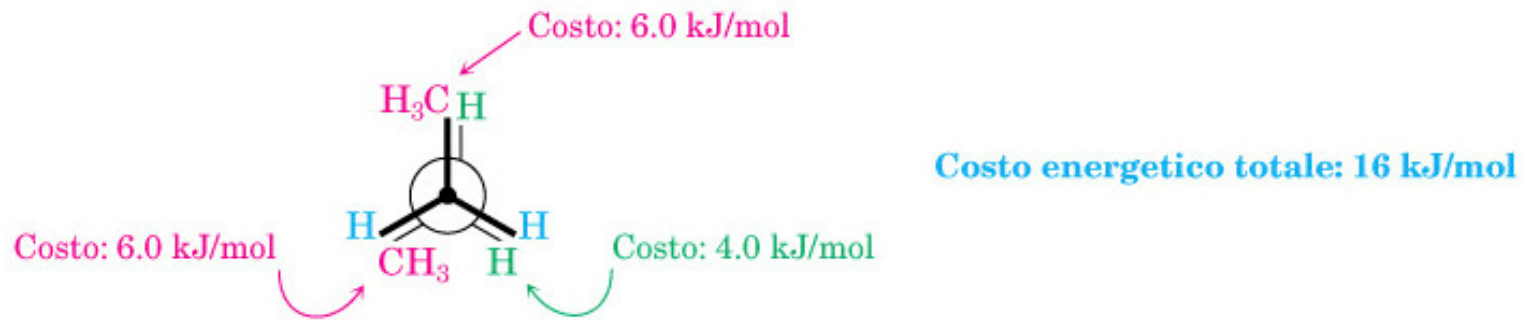




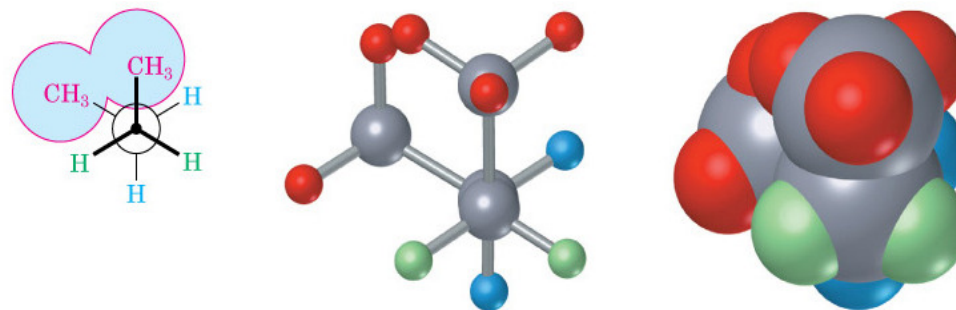
Grafico di energia potenziale in funzione della rotazione del legame C2-C3 nel butano. Il massimo di energia corrisponde alla conformazione con i due gruppi metilici eclissati e il minimo di energia corrisponde alla situazione in cui due metili sono a  $180^\circ$  (assetto anti).





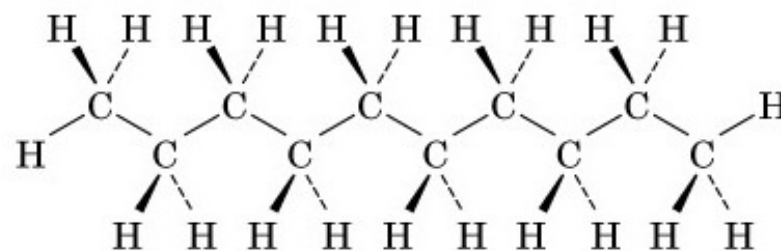
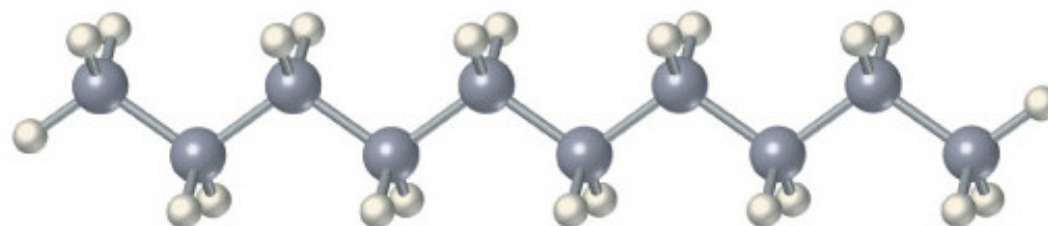
## Tensione sterica

Interazione fra gli atomi di idrogeno metilici nel butano gauche. La tensione sterica deriva dal fatto che i due gruppi metilici sono troppo vicini fra loro.

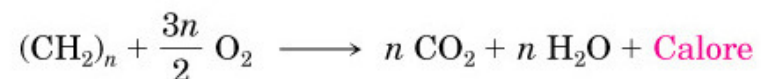
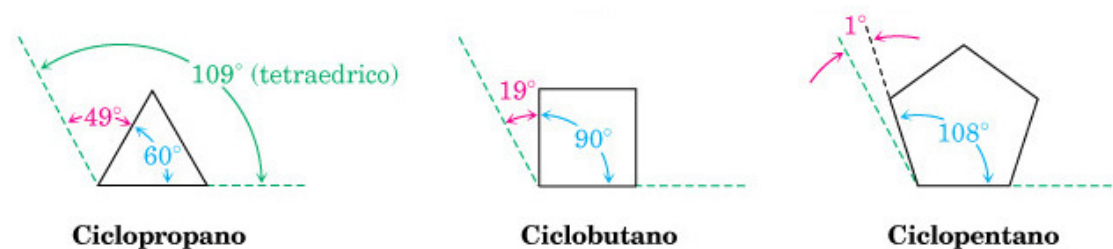




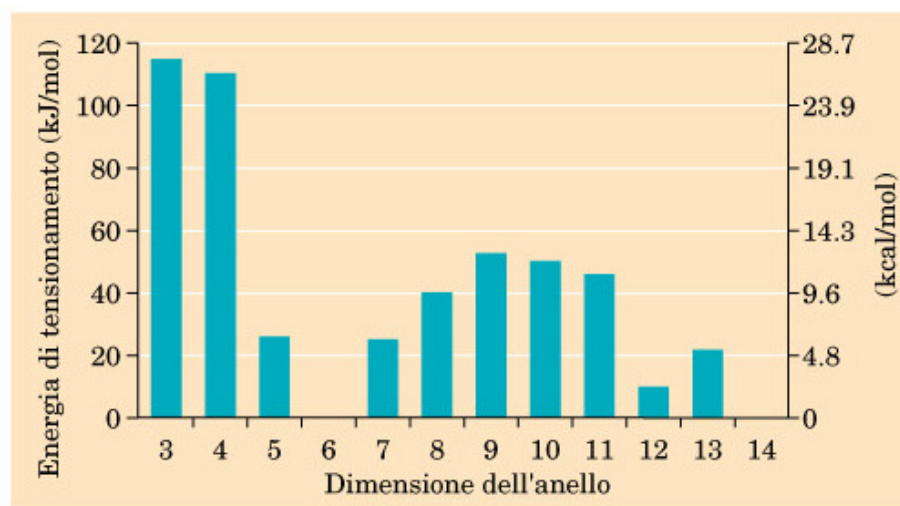
La conformazione più stabile di un alcano è quella totalmente sfalsata in cui i legami carbonio-carbonio presentano un assetto anti, come mostrato in questo modello del decano.



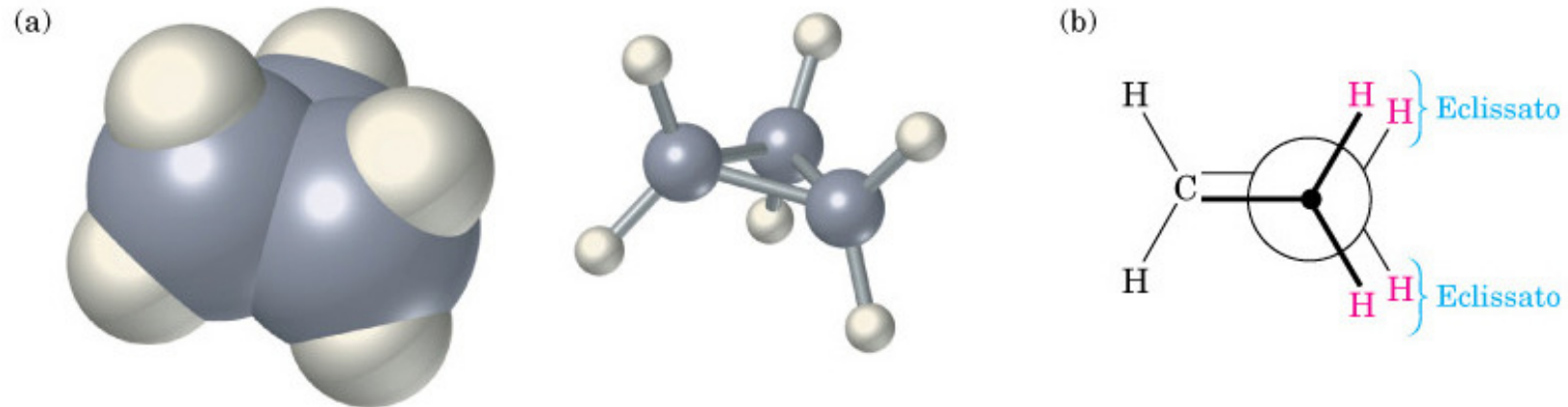
## Tensione angolare



Energia di tensione dei cicloalcani, calcolate per differenza fra il calore di combustione per  $\text{CH}_2$  di un cicloalcano e il calore di combustione per  $\text{CH}_2$  di un alcano aciclico e moltiplicando per il numero di unità  $\text{CH}_2$  dell'anello. Gli anelli di piccole e medie dimensioni sono tensionati, mentre il cicloesano risulta esente da tensione.



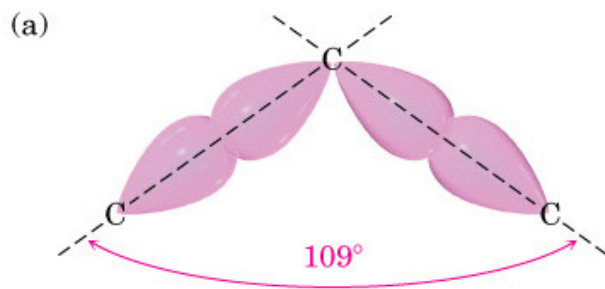
Conformazione del **ciclopropano**. L'eclissamento dei legami C-H adiacenti determina tensione torsionale. La parte (b) è una proiezione di Newman lungo un legame C-C.



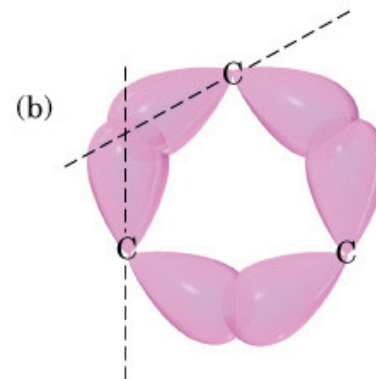
Tensione angolare: si origina dalla espansione o compressione degli angoli di legame

Tensione torsionale: causata dall'eclissamento di legami su atomi adiacenti

Tensione sterica: causata dall'interazione repulsiva tra atomi che vengono a trovarsi troppo vicini



Tipico legame C—C negli alcani



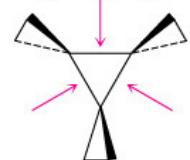
Legame C—C piegato nel ciclopropano

Mappa di densità elettronica determinata attraverso studi ai raggi X effettuati a bassa temperatura. La prospettiva dall'alto della molecola evidenzia come la densità elettronica dei legami del ciclopropano dell'anello centrale sia piegata al di fuori dell'asse internucleare.

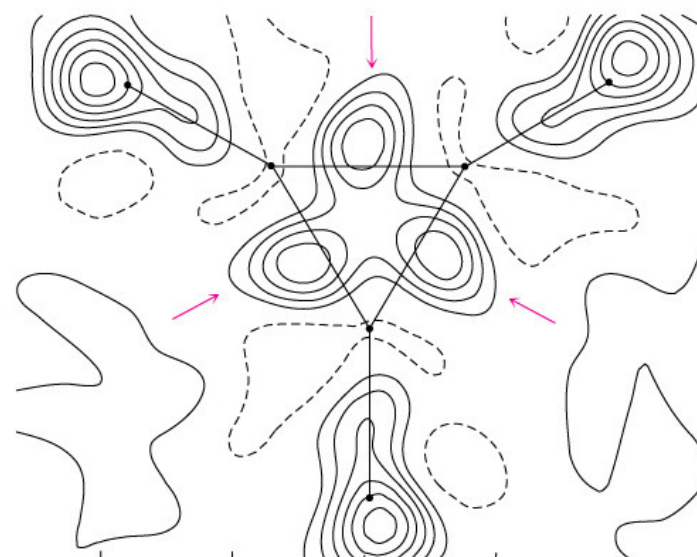


Vista laterale

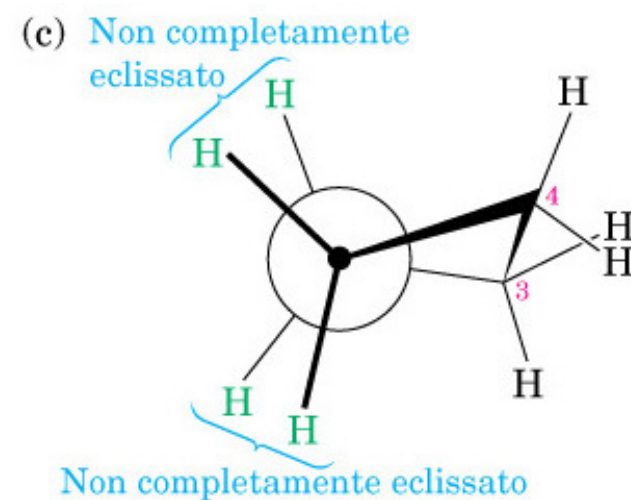
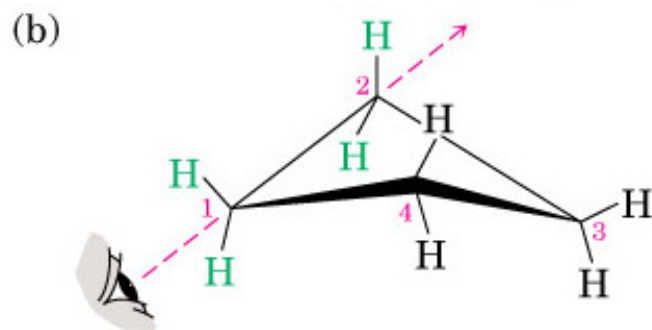
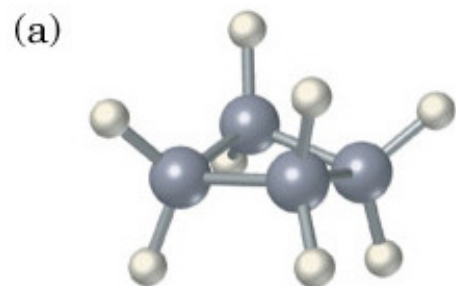
Legame piegato



Vista dall'alto



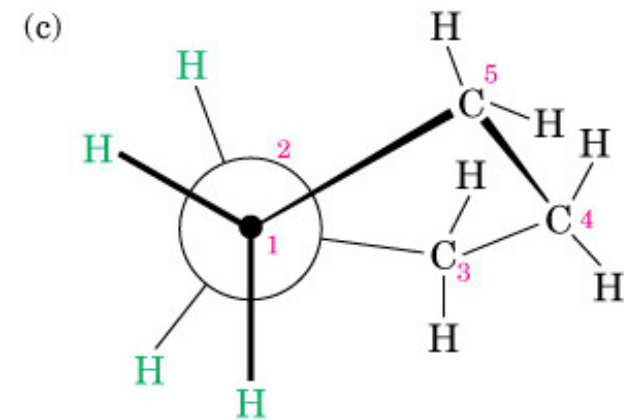
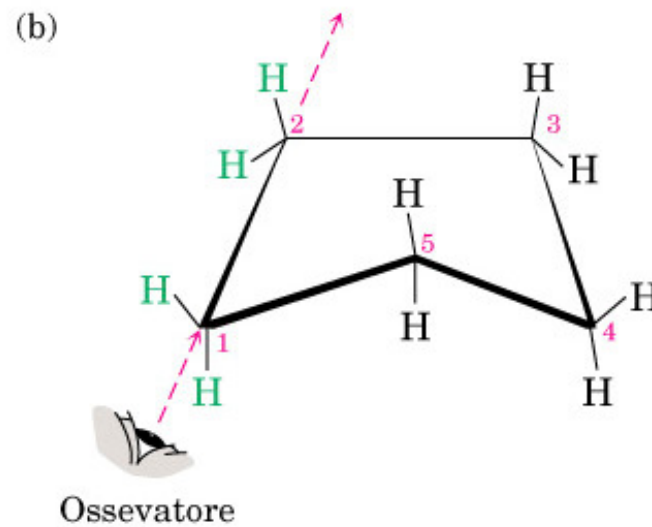
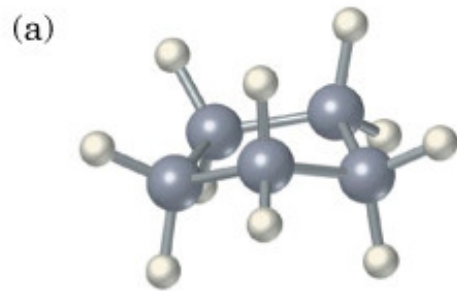
Conformazione del **ciclobutano**. La parte (c) è una proiezione di Newman rispetto al legame C1–C2 che evidenzia il non completo eclissamento dei legami C-H adiacenti.



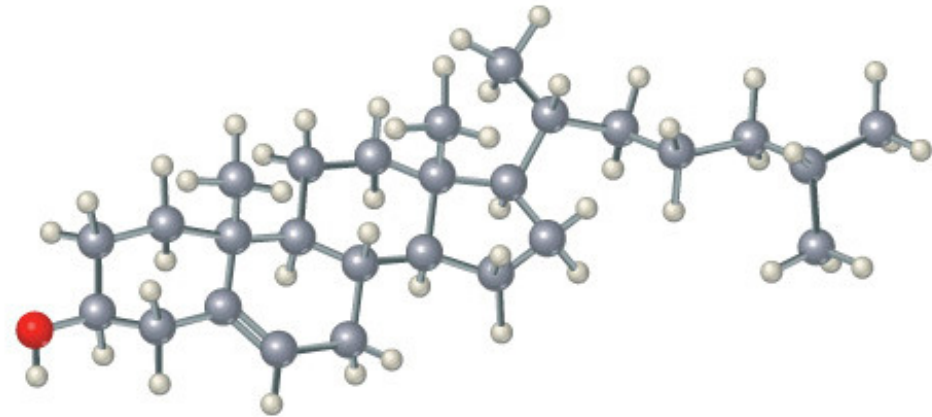
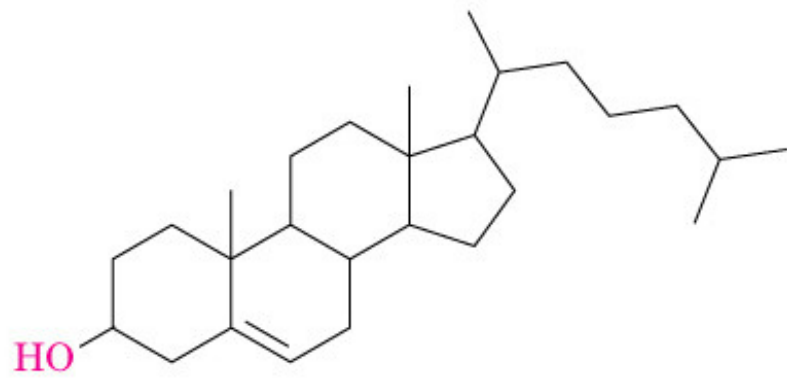
Minor tensione angolare rispetto al ciclopropano  
Maggior tensione torsionale (più atomi di idrogeno)  
Analogia tensione totale

Conformazione del **ciclopentano**. Gli atomi di carbonio 1, 2, 3 e 4 sono pressoché su un piano, mentre il carbonio 5 è al di fuori del piano.

Nella parte (c) la proiezione di Newman rispetto al legame C1–C2 evidenzia che i legami C–H adiacenti sono pressoché sfalsati.



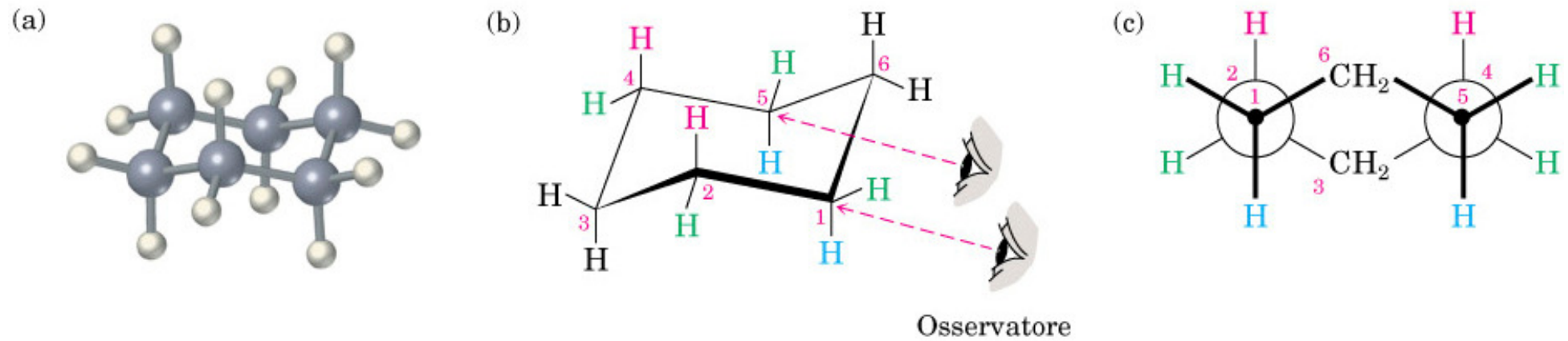
cicloesano



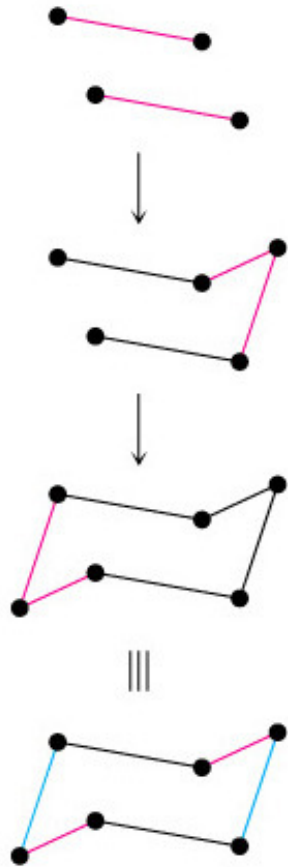
**Colesterolo**



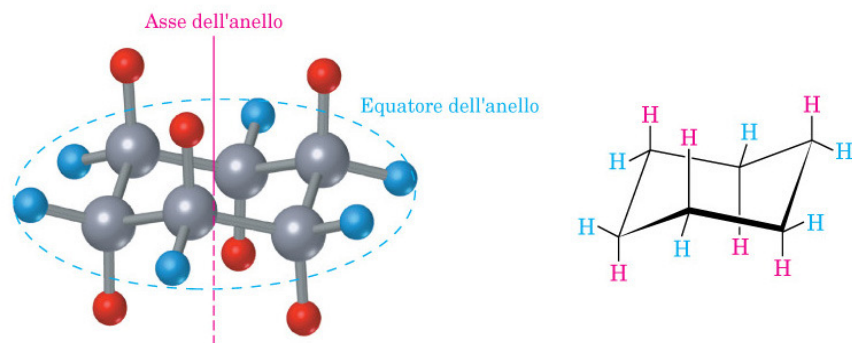
La conformazione a sedia del cicloesano esente da tensione.  
Tutti gli angoli di legame C-C-C sono di  $111.5^\circ$  (un valore vicino al valore tetraedrico ideale di  $109.5^\circ$ ), e tutti i legami C-H adiacenti sono sfalsati.



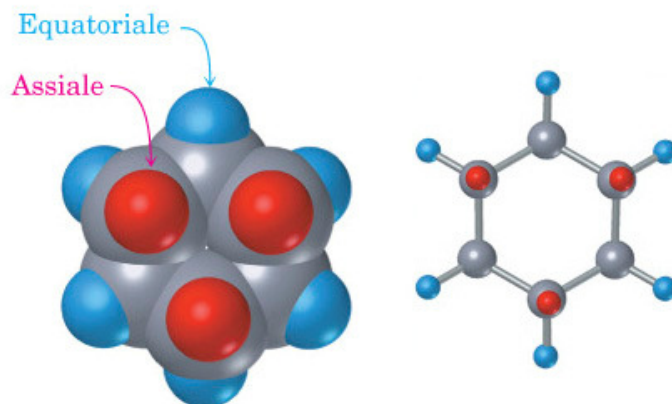
# Stereochimica



Atomi di idrogeno assiali (in rosso) ed equatoriali (in blu) in un cicloesano a sedia. I sei atomi di idrogeno assiali sono paralleli all'asse dell'anello e i sei atomi di idrogeno equatoriali si trovano in una fascia intorno all'equatore dell'anello.



Disposizione alternata delle posizioni assiali ed equatoriali nel cicloesano a sedia come si evidenzia guardando la molecola lungo la direzione dell'asse dell'anello. Ogni atomo di carbonio ha un sostituyente assiale e uno equatoriale e ogni faccia ha sostituenti assiali ed equatoriali che si alternano.



Procedimento per disegnare i legami assiali ed equatoriali nel cicloesano a sedia.

**Legami assiali:** I sei legami assiali, uno su ciascun atomo di carbonio, sono paralleli e alternativamente su-giù.



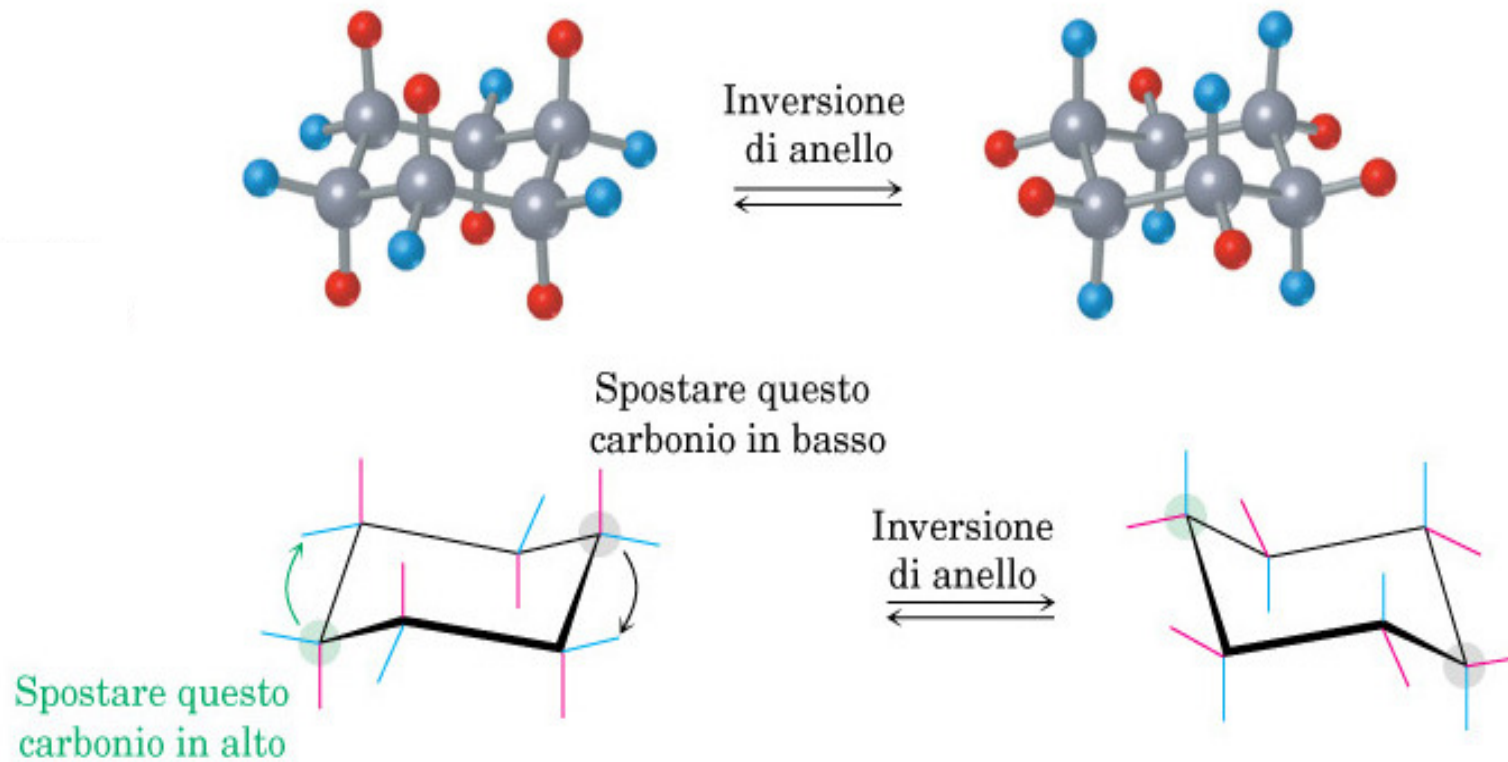
**Legami equatoriali:** I sei legami equatoriali, uno su ciascun atomo di carbonio, rientrano in tre gruppi di due linee parallele. Ogni gruppo è parallelo anche a due legami dell'anello. I legami equatoriali si alternano sulle due facce dell'anello.



**Cicloesano completo**

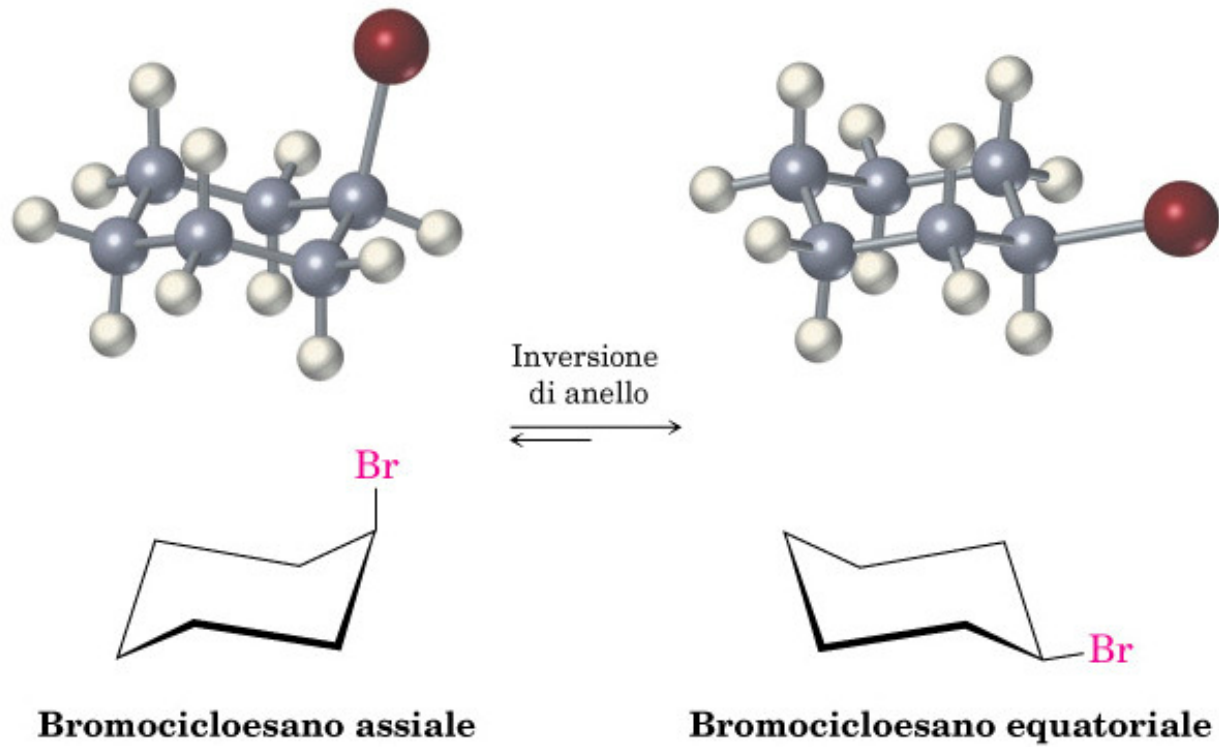


L'inversione d'anello nel cicloesano a sedia interconverte le posizioni assiali ed equatoriali.

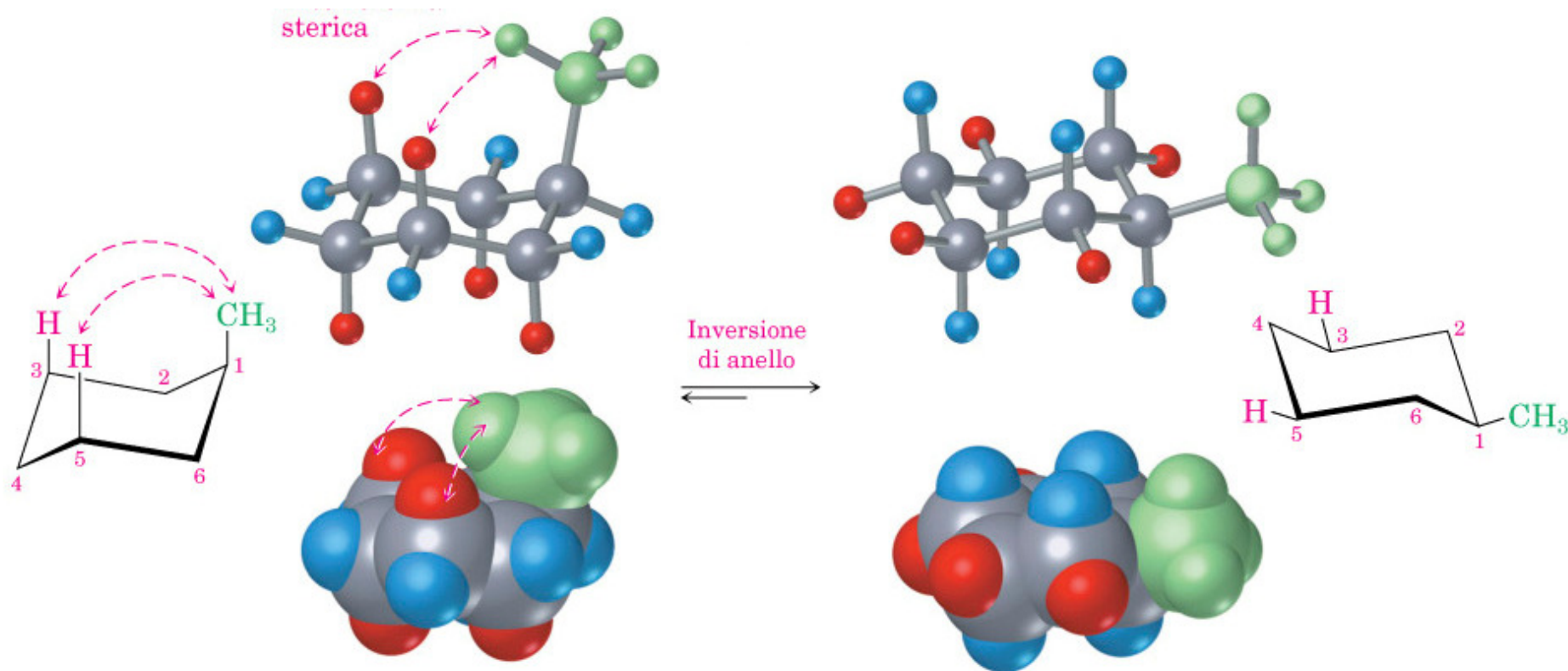


45 kJmol<sup>-1</sup>

Inversione rapida a temperatura ambiente



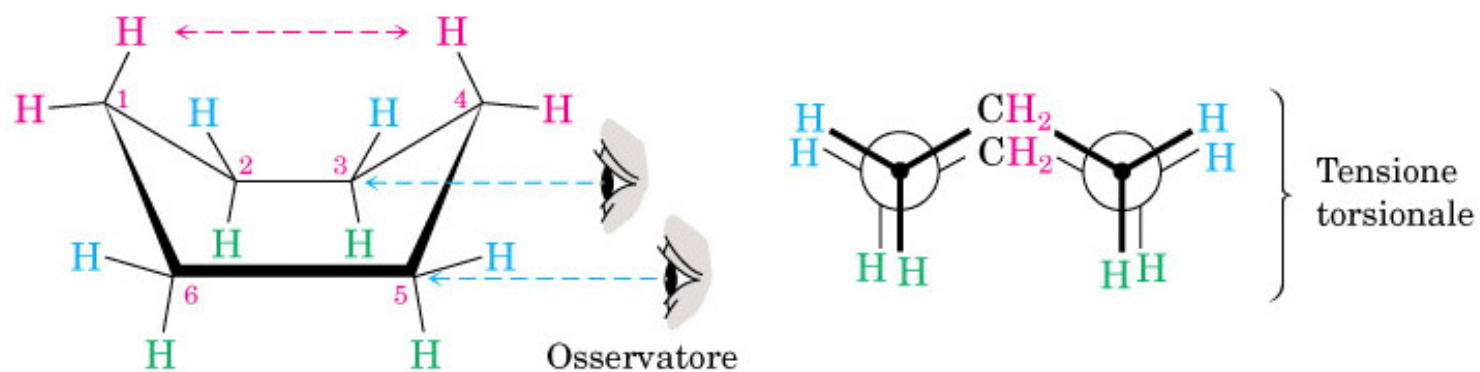
L'interconversione assiale-equatoriale di un metilcicloesano è rappresentata in vari modi. Il conformero equatoriale è più stabile di quello assiale di 7.6 kJ/mol.





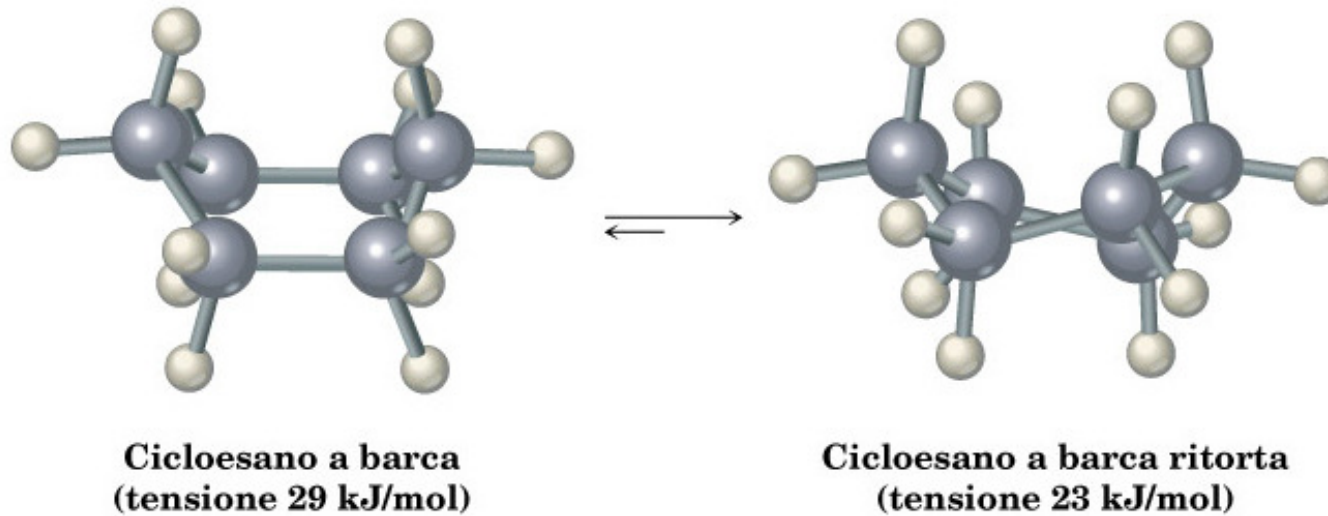
## Conformazione a barca

Tensione sterica degli atomi di idrogeno  
a C1 e C4



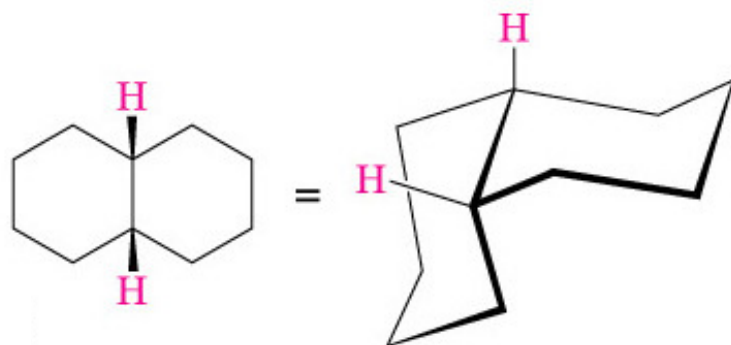
No tensione angolare  
Ma tensione torsionale e sterica

Conformazioni a barca e barca ritorta del cicloesano. La conformazione ritorta è più stabile di quella a barca di circa 6 kJ/mol, ma entrambe sono molto più tensionate della conformazione a sedia.

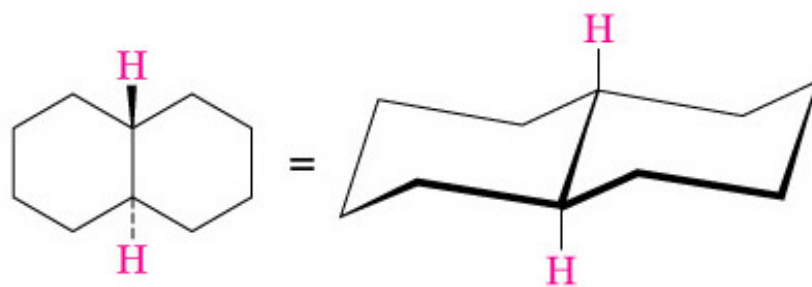
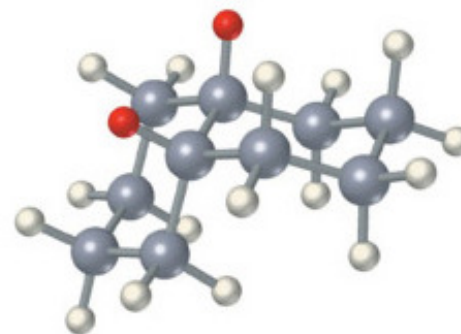


## Molecole policicliche

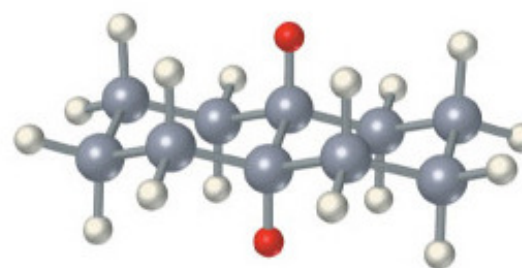
Rappresentazioni della cis- e trans-decalina. Nell'isomero cis, gli atomi di idrogeno (in rosso) legati agli atomi di carbonio a testa di ponte sono sulla stessa faccia dei due anelli, mentre nell'isomero trans giacciono su facce opposte.

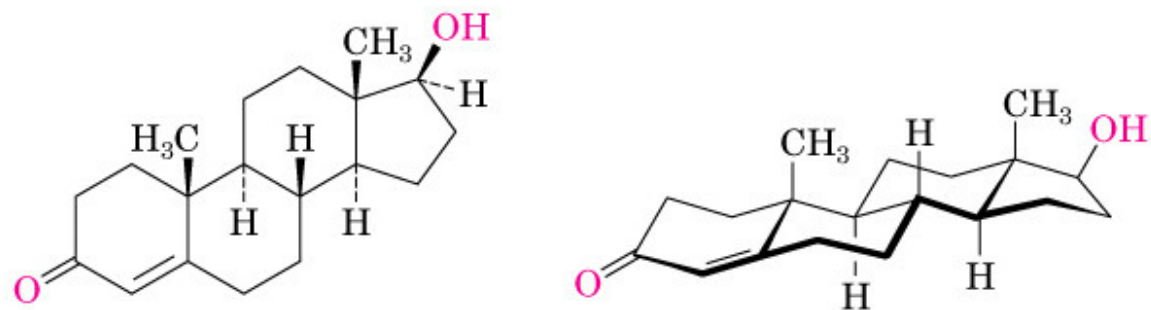


*cis-Decalina*

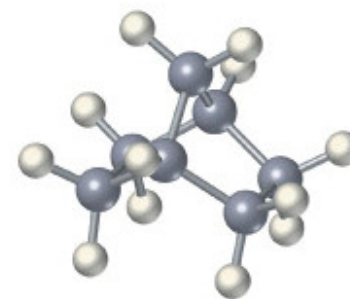
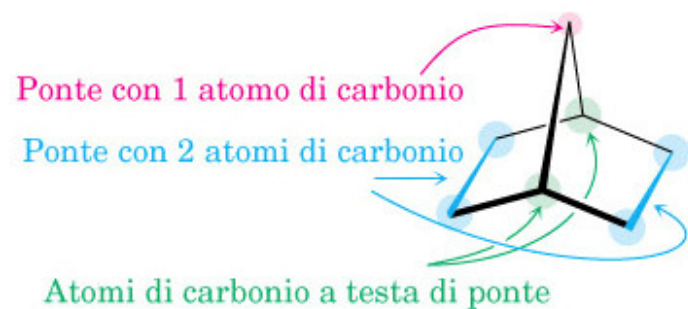


*trans-Decalina*

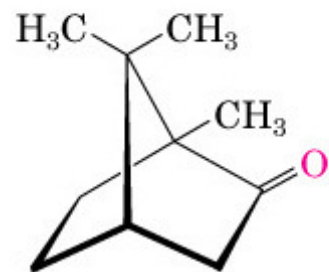




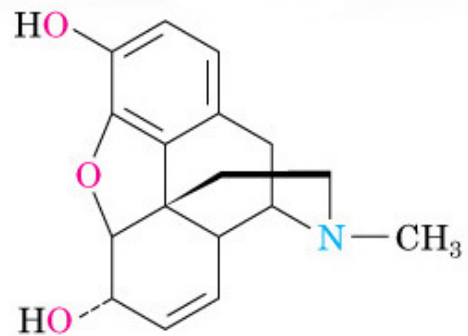
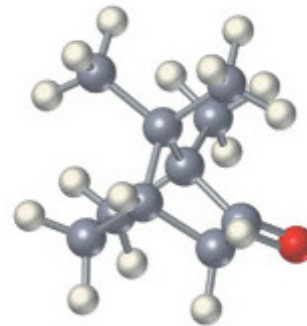
**Testosterone (steroide)**



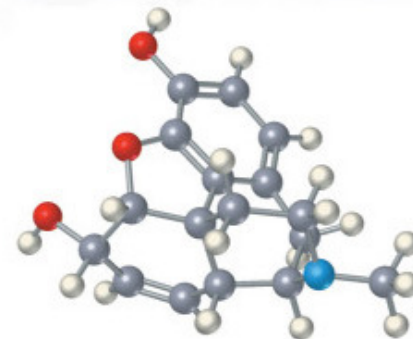
**Norbornano  
(Biciclo[2.2.1]eptano)**



**Canfora**



**Morfina**



Struttura della morfina e modello molecolare della sua conformazione di minima energia determinata attraverso calcoli di meccanica molecolare.