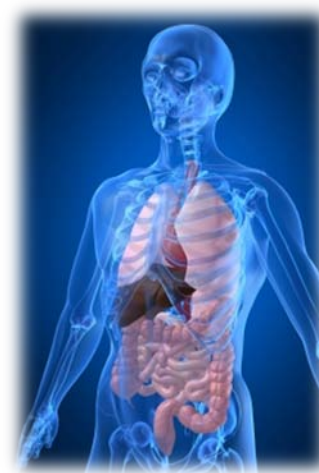




ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

4^η θεματική ενότητα: Γενικοί κανόνες ονοματολογίας Στερεοχημεία αλκανίων



Σχολή: Περιβάλλοντος
Τμήμα: Επιστήμης Τροφίμων και Διατροφής
Εκπαιδευτής: Χαράλαμπος Καραντώνης



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Άδειες Χρήσης

- ❑ Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- ❑ Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αιγαίου**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.



- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



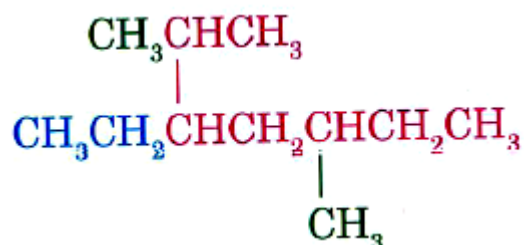
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

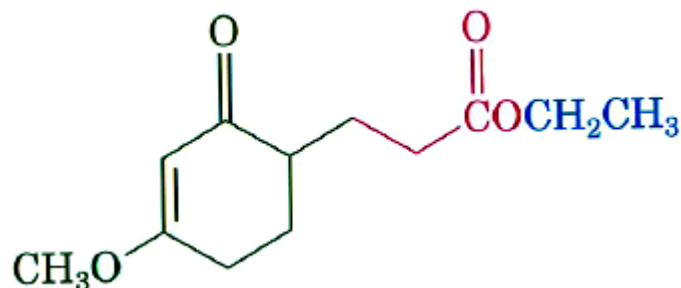


ΓΕΝΙΚΟΙ ΚΑΝΟΝΕΣ ΟΝΟΜΑΤΟΛΟΓΙΑΣ

Πολυυποκατεστημένες ενώσεις



**3-Αιθυλο-2,5-διμεθυλο
επτάνιο**



**3-(4-Μεθοξυ-2-οξο-3-κυκλοεξενυλο)-
προπανοϊκό αιθύλιο**

- 1) Γνώση ονοματολογίας απλών ενώσεων
- 2) Πρόσθετους κανόνες

Ονοματολογία ενώσεων με πολλές λειτουργικές ομάδες

Η ονομασία μιας πολυυποκατεστημένης ένωσης αποτελείται από 4 μέρη

1. Κατάληξη :

Το μέρος που φανερώνει την κύρια κατηγορία λειτουργικής ομάδας στην οποία ανήκει το μόριο

2. Κορμός :

Φανερώνει το μέγεθος της κύριας αλυσίδας ή δακτυλίου

3 και 4. Προθέματα και αριθμοί υποκαταστατών:

Φανερώνουν το είδος και την θέση των υποκαταστατών στην κύρια αλυσίδα ή το δακτύλιο

Ονοματολογία ενώσεων με πολλές λειτουργικές ομάδες

1) Κατάληξη:

Το μέρος που φανερώνει την κύρια κατηγορία λειτουργικών ομάδων στην οποία ανήκει το μόριο



Δύο κατηγορίες λειτουργικών ομάδων:

- Κύριες ομάδες (καταλήξεις ή προθέματα)
- Δευτερεύουσες ομάδες (προθέματα)

Σειρά προτεραιότητας για τις κύριες ομάδες

ΠΩΣ ΕΠΙΛΕΓΟΥΜΕ
ΚΑΤΑΛΗΞΗ;

Επιλογή κατάληξης

<i>Λειτουργική ομάδα</i>	<i>Ονομασία ως κατάληξη</i>	<i>Ονομασία ως πρόθεμα</i>
Κύριες ομάδες		
Καρβοξυλικά οξέα	-οϊκό οξύ ή -καρβοξυλικό οξύ	καρβοξυ
Ανυδρίτες οξέων	-οϊκός ανυδρίτης ή -καρβοξυλικός ανυδρίτης	
Εστέρες	-οϊκός ή -καρβοξυλικός	αλκοξυκαρβονυλο
Αλογονίδια οξέων	-ύλο αλογονίδιο ή -καρβονυλο αλογονίδιο	αλογονοκαρβονυλο
Αμίδια	-αμίδιο ή -καρβοξαμίδιο	αμιδο
Νιτρίλια	-νιτρίλιο ή -καρβονιτρίλιο	κυανο

Επιλογή κατάληξης

Λειτουργική ομάδα

Ονομασία ως κατάληξη

Ονομασία ως πρόθεμα

ΚΥΡΙΕΣ ΟΜΑΔΕΣ ΣΥΝΕΧΕΙΑ

Αλδεΐδες

-άλη

οξο

ή -καρβαλδεΐδη

Κετόνες

-όνη

οξο

Αλκοόλες

-όλη

υδροξυ

Φαινόλες

-όλη

υδροξυ

Θειόλες

-θειόλη

μερκαπτο

Αμίνες

-αμίνη

αμινο

Ιμίνες

-ιμίνη

ιμινο

Αλκένια

-ένιο

αλκενυλο

Αλκύνια

-ύνιο

αλκυνυλο

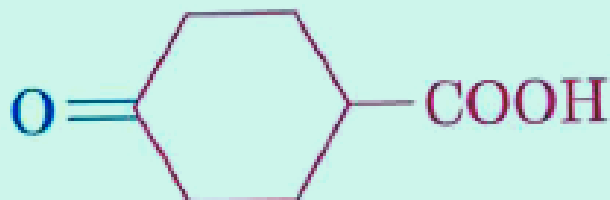
Αλκάνια

-άνιο

αλκυλο



Ονοματίζεται ως εστέρας με έναν οξο (κετο) υποκαταστάτη:
4-οξοπεντανοϊκό μεθύλιο



Ονοματίζεται ως κυκλοεξανοκαρβοξυλικό οξύ με έναν οξο υποκαταστάτη:
4-οξο-κυκλοεξανοκαρβοξυλικό οξύ



Ονοματίζεται ως αλκοόλη με υποκαταστάτη αμινομάδα:
5-αμινο-2-πεντανόλη



5-μεθυλο-6-οξοεξανοϊκό μεθύλιο

Επιλογή κατάληξης

Λειτουργική ομάδα

Ονομασία ως κατάληξη

Ονομασία ως πρόθεμα

Δευτερεύουσες ομάδες

Αιθέρες

Σουλφίδια

Αλογονίδια

Νιτρο

Αζιδο

Διαζω

αλκοξυ

αλκυλοθειο

αλογονο

νιτρο

αζιδο

διαζω

^a Οι κύριες λειτουργικές ομάδες κατατάσσονται κατά σειρά ελαττούμενης προτεραιότητας. Οι δευτερεύουσες ομάδες δεν έχουν καθιερωμένη σειρά προτεραιότητας.

Ονοματολογία ενώσεων με πολλές λειτουργικές ομάδες

ΕΠΙΛΟΓΗ ΑΛΥΣΙΔΑΣ ή ΔΑΚΤΥΛΙΟΥ

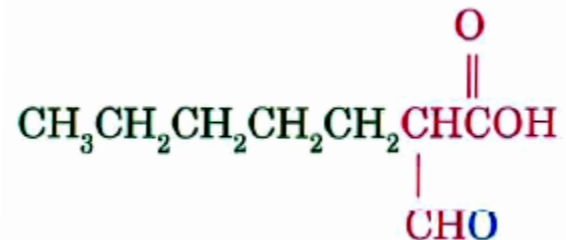
2) Κορμός :

Φανερώνει το μέγεθος της κύριας αλυσίδας ή δακτυλίου

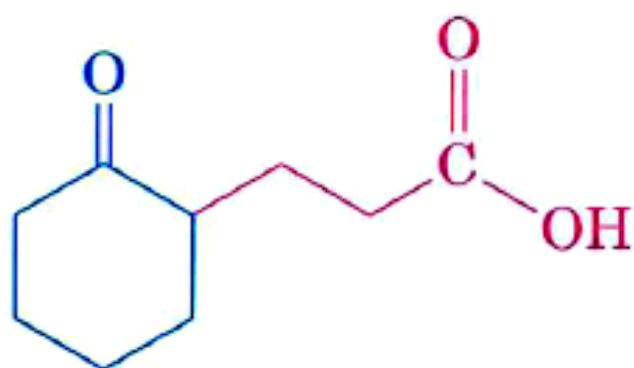
- Η ομάδα με την υψηλότερη προτεραιότητα αποτελεί μέρος μιας ανοικτής αλυσίδας: **Επιλέγουμε την μακρύτερη αλυσίδα που περιέχει τον μεγαλύτερο αριθμό λειτουργικών ομάδων**
- Η ομάδα με την μεγαλύτερη προτεραιότητα συνδέεται σε δακτύλιο: **Χρησιμοποιούμε το όνομα του δακτυλίου ως μητρικό**



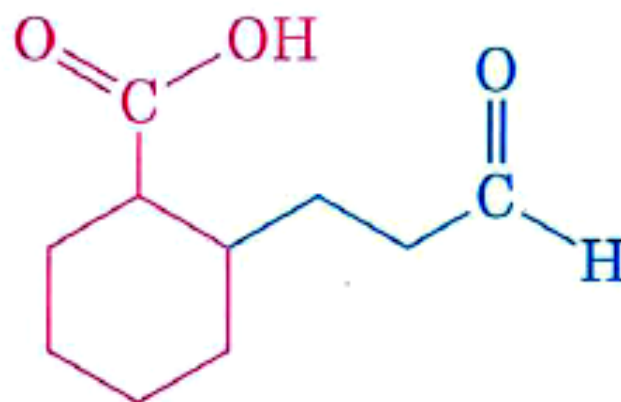
6-μεθυλο-7-οξοεπτανοϊκό οξύ



3-οξο-2-πεντυλοπροπανοϊκό οξύ



3-(2-οξοκυκλοεξυλο)προπανοϊκό οξύ



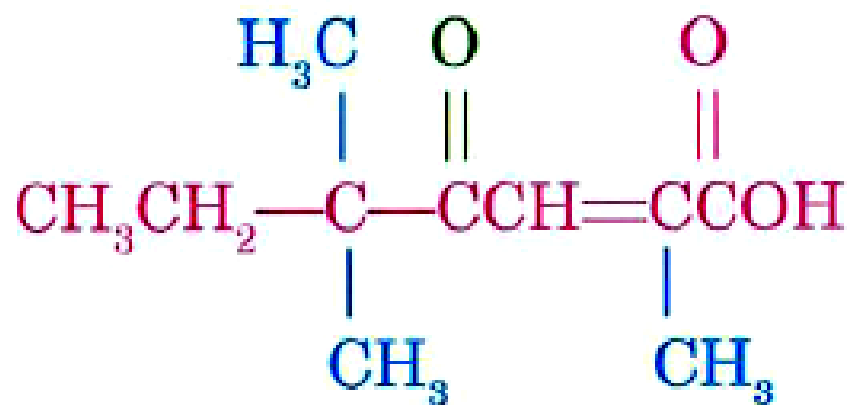
**2-(3-οξοπροπυλο)κυκλοεξανοκαρβο-
ξυλικό οξύ**

Ονοματολογία ενώσεων με πολλές λειτουργικές ομάδες

3. Προθέματα και αριθμοί υποκαταστατών : Φανερώνουν το είδος και την θέση των υποκαταστατών στην κύρια αλυσίδα ή τον δακτύλιο

- Αναγνωρίζουμε όλους τους υποκαταστάτες στην μητρική αλυσίδα
- Αριθμούμε από το άκρο το πλησιέστερο στην λειτουργική ομάδα με την υψηλότερη προτεραιότητα

Οι υποκαταστάτες περιλαμβάνουν όλες τις αλκυλομάδες και όλες τις λειτουργικές ομάδες, εκτός από αυτήν που αναφέρεται ως κατάληξη.



2,5,5-τριμεθυλο-4-οξο-2-επιενοϊκό οξύ

Αναγραφή ονομασίας

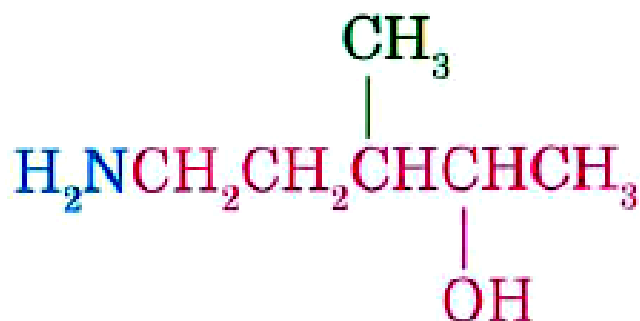
Σειρά προθεμάτων

- Παράθεση υποκαταστατών με αλφαβητική σειρά
- Τα πολλαπλασιαστικά δι-, τρι- δεν υπολογίζονται στην αλφαβητική παράθεση, ενώ υπολογίζεται το πρόθεμα ισο-

Παρενθέσεις

- Χρησιμοποιούνται για να ορίσουν σύνθετους υποκαταστάτες
- Η έκφραση μέσα στην παρένθεση δεν χωρίζεται από την υπόλοιπη ονομασία

Σειρά προθεμάτων

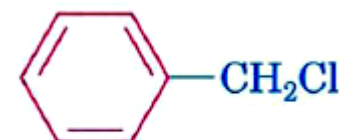


5-Αμινο-3-μεθυλο-2-πεντανόλη
(όχι 3-μεθυλο-5-αμινο-2-πεντανόλη)

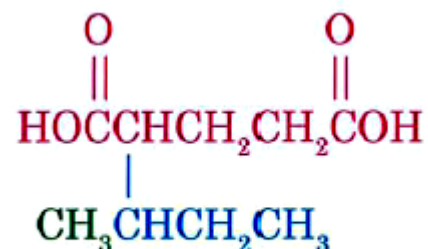
Παρενθέσεις



p-Χλωρομεθυλοβενζόλιο



(Χλωρομεθυλο)βενζόλιο



2-(1-Μεθυλοπροπυλο)πεντανοδιοϊκό οξύ

Στερεοχημεία αλκανιων και κυκλοαλκανίων

- Η **στερεοχημεία** είναι ο κλάδος της χημείας που ασχολείται με τη διάταξη των μορίων στο χώρο.
(Τρίτη διάσταση-χημική συμπεριφορά)
- Η διάταξη των μορίων στο χώρο είναι πολύ σημαντική καθώς επηρεάζει τη χημική συμπεριφορά των μορίων

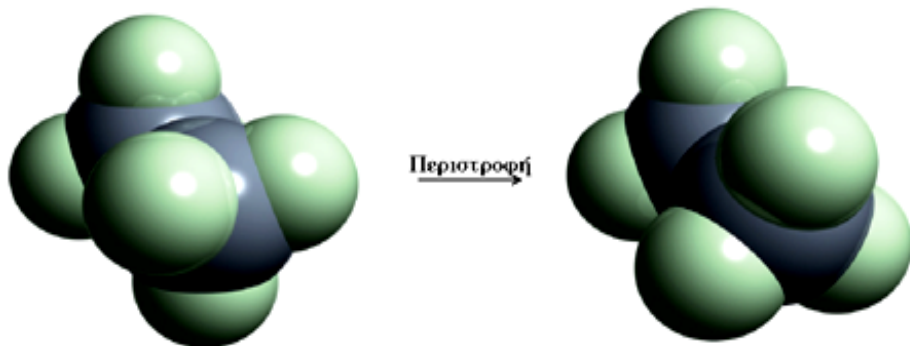
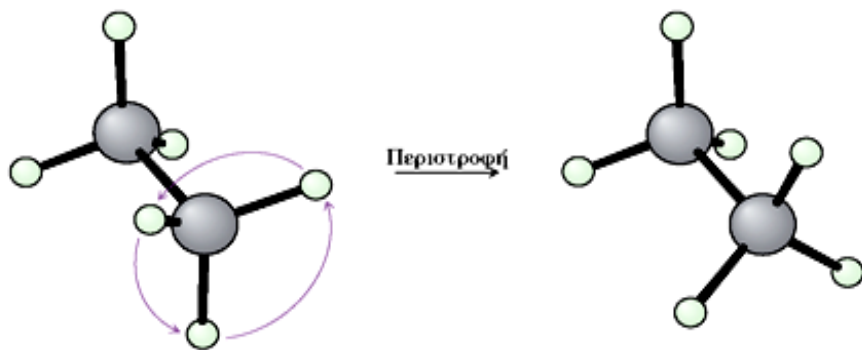
Διαμορφώσεις του αιθανίου

Δεσμικότητα τύπου σ: Αλληλοεπικάλυψη των sp^3 των ατόμων άνθρακα

Η αλληλεπικάλυψη των τροχιακών στον απλό δεσμό C-C είναι η ίδια, ανεξάρτητα από τις γεωμετρικές διατάξεις των ατόμων στο χώρο

Διαμορφώσεις: Οι διαφορετικές διατάξεις των ατόμων, οι οποίες προκύπτουν από την περιστροφή γύρω από έναν απλό δεσμό

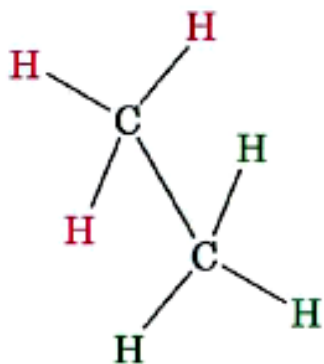
Διαμορφομερές: Κάθε συγκεκριμένη διαμόρφωση.



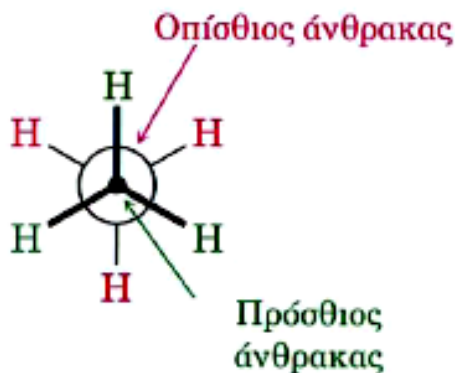
Παρατήρηση

Σε αντίθεση με τα **συντακτικά ισομερή**, τα διαφορετικά **διαμορφομερή** συνήθως δεν μπορούν να απομονωθούν γιατί μετατρέπονται πολύ γρήγορα το ένα στο άλλο.

Αναπαράσταση διαμορφομερών



Πλαγιογωνιακή
αναπαράσταση



Προβολή
κατά Newman

Πλαγιογωνιακές αναπαραστάσεις

Αναπαράσταση δεσμού άνθρακα-άνθρακα υπό λοξή γωνία (φαίνονται όλες οι διατάξεις των δεσμών C-H στο χώρο).

Προβολές κατά Newman

Ο δεσμός άνθρακα-άνθρακα προβάλλεται σε ένα κάθετο επίπεδο και τα δύο άτομα του άνθρακα υποδηλώνονται από έναν κύκλο.

Δεσμοί «πρόσθιου» άνθρακα:

Γραμμές που ξεκινούν από το κέντρο του κύκλου.

Δεσμοί «οπίσθιου» άνθρακα:

Γραμμές οι οποίες ξεκινούν από την περιφέρεια του κύκλου.

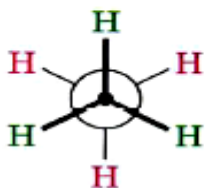
Πλεονεκτήματα:

(α) Σχεδιάζονται εύκολα

(β) Είναι ευδιάκριτη η διάταξη στο χώρο των υποκαταστατών στους διαφορετικούς άνθρακες.

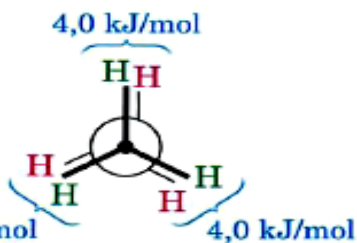
«ΕΛΕΥΘΕΡΗ ΠΕΡΙΣΤΡΟΦΗ» ΔΕΣΜΟΥ C-C ΣΤΟ ΑΙΘΑΝΙΟ

Ορισμένες διαμορφώσεις είναι σταθερότερες από άλλες



Διαβαθμισμένη
διαμόρφωση
αιθανίου

Περιστροφή
του οπίσθιου
άνθρακα κατά 60°



Εκλειπτική
διαμόρφωση
αιθανίου

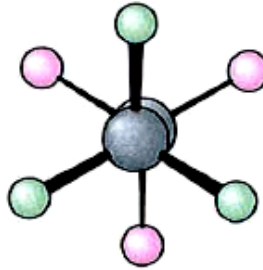
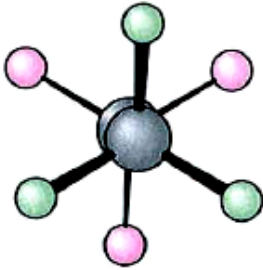
Διαβαθμισμένη διαμόρφωση (ως προβολή κατά Newman):
Η περισσότερο σταθερή διαμόρφωση (χαμηλότερης ενέργειας).
Οι έξι δεσμοί άνθρακα-υδρογόνου απέχουν όσο το δυνατόν περισσότερο ο ένας από τον άλλο

Ανάμεσα στη διαβαθμισμένη και στην εκλειπτική διαμόρφωση υπάρχει ένας άπειρος αριθμός από άλλες πιθανές διαμορφώσεις.

Εκλειπτική διαμόρφωση (ως προβολή κατά Newman):
Η λιγότερο σταθερή διαμόρφωση (υψηλότερης ενέργειας).
Οι έξι δεσμοί άνθρακα-υδρογόνου βρίσκονται όσο το δυνατόν πλησιέστερα μεταξύ τους.

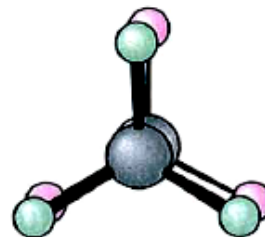
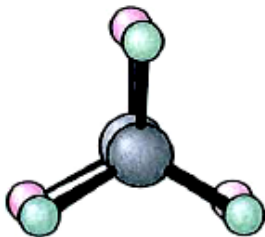
Τάση στρέψης ή περιστροφική τάση: Ενέργεια

ΔΙΑΜΟΡΦΩΣΕΙΣ ΑΙΘΑΝΙΟΥ



Διαβαθμισμένη
διαμόρφωση

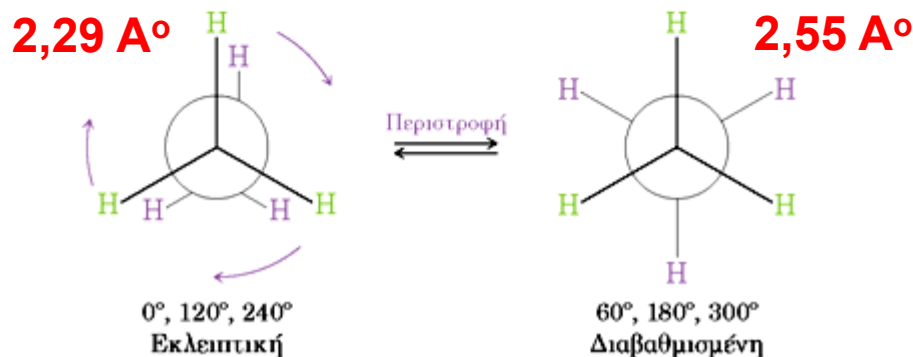
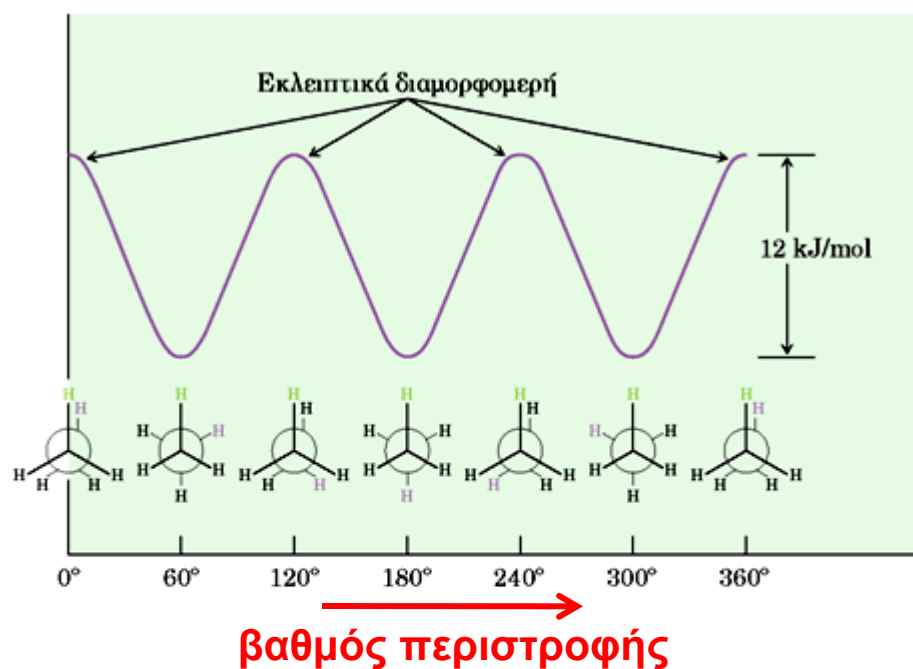
Στερεοσκοπική άποψη



Εκλειπτική
διαμόρφωση

Στερεοσκοπική άποψη

Δυναμική ενέργεια και περιστροφή δεσμού C₁-C₂ Αιθάνιο



Τα διαβαθμισμένα διαμορφωμερή είναι ενεργειακά χαμηλότερα απ' ό τι τα αντίστοιχα εκλειπτικά

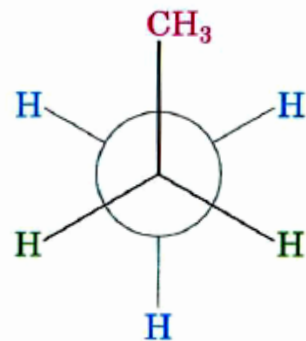
Τα ενεργειακά ελάχιστα εμφανίζονται στις διαβαθμισμένες διαμορφώσεις, ενώ τα ενεργειακά μέγιστα στις εκλειπτικές διαμορφώσεις.

Τάση στρέψης ή περιστροφική τάση (torsional strain):

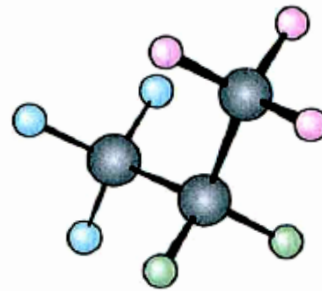
Η επιπλέον ποσότητα ενέργειας που διαθέτει η εκλειπτική διαμόρφωση.

Οφείλεται στην ελαφρά άπωση που αναπτύσσεται ανάμεσα στα ηλεκτρονικά νέφη των δεσμών άνθρακα-υδρογόνου, καθώς προσεγγίζεται εκλειπτική διαμόρφωση.

Δυναμική ενέργεια και περιστροφή δεσμού C₁-C₂ στο προπάνιο

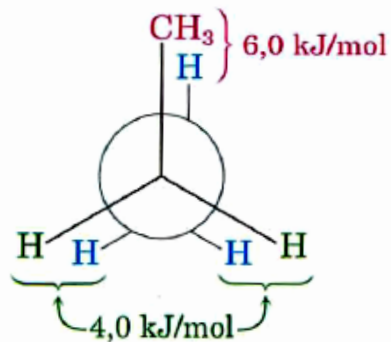


Διαβαθμισμένο προπάνιο

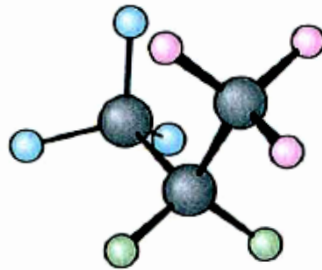


Στερεοσκοπική άποψη

↓ Περιστροφή κατά 60°

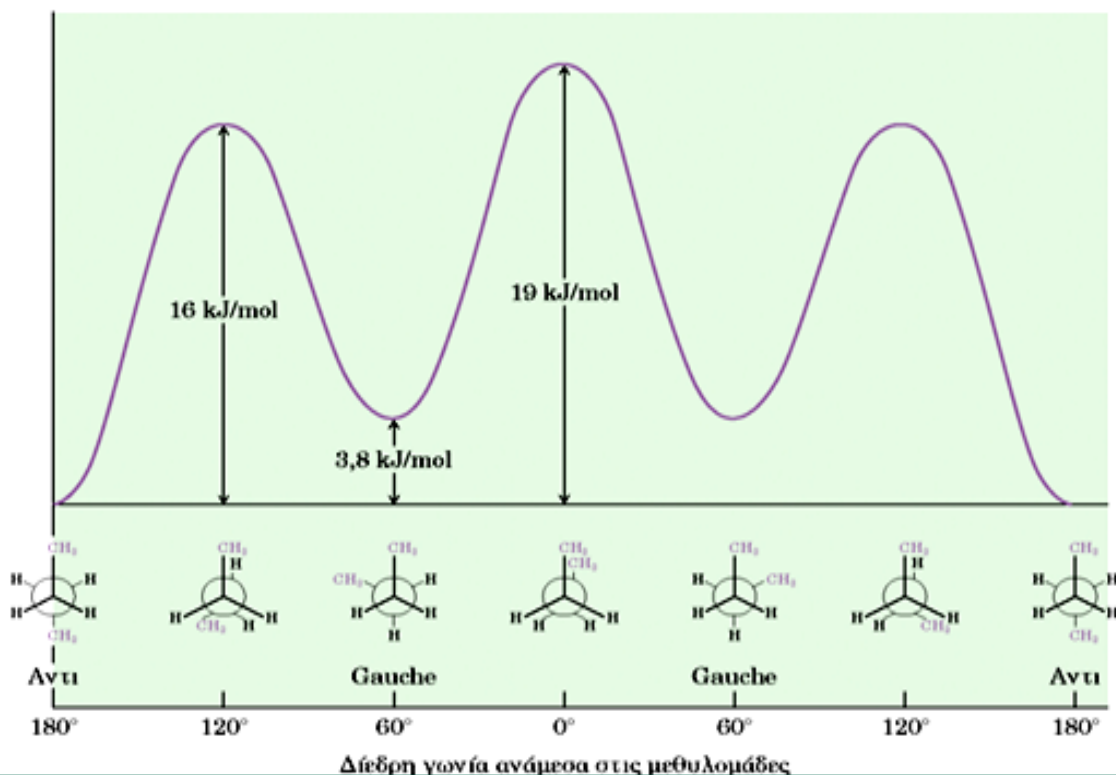


Εκλειπτικό προπάνιο



Στερεοσκοπική άποψη

Δυναμική ενέργεια και περιστροφή δεσμού C₂-C₃ Βουτάνιο

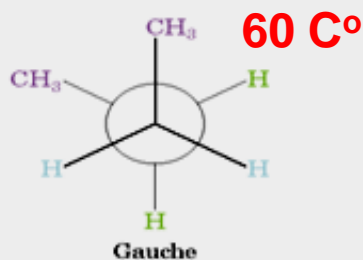
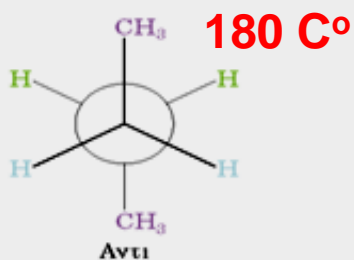


Η διαμόρφωση με τη χαμηλότερη ενέργεια ονομάζεται διαμόρφωση **αντι** (μεθυλομάδες στη μεγαλύτερη δυνατή απόσταση μεταξύ τους)

Η διαβαθμισμένη διαμόρφωση που αντιστοιχεί σε ένα ενεργειακό ελάχιστο λέγεται **gauche** (μεθυλομάδες σχηματίζουν διεδρη γωνία 60°)

Στεreoχημική τάση:

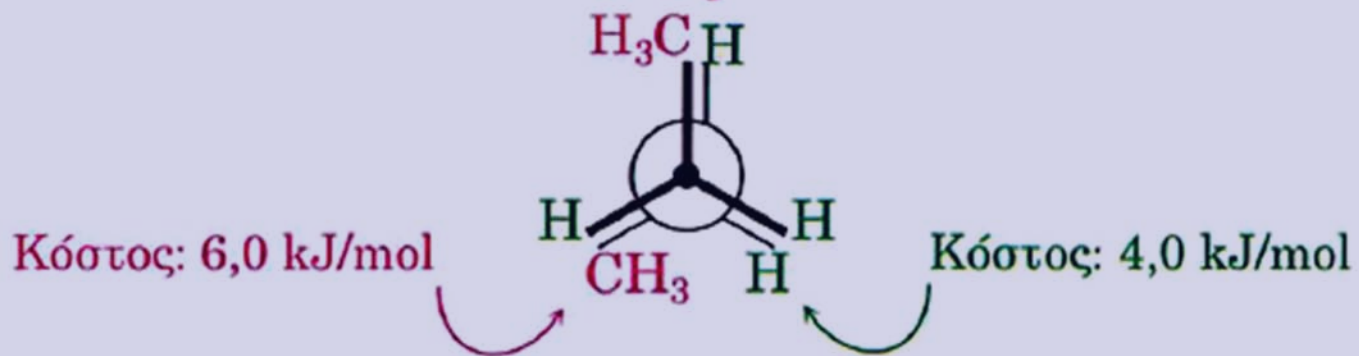
Ενέργεια λόγω απωστικής αλληλεπίδρασης που αναπτύσσεται όταν τα άτομα αναγκάζονται να έλθουν το ένα με το άλλο εγγύτερα απ'ότι επιτρέπουν οι ατομικές τους ακτίνες.



Εκλειπτικές Διαμορφώσεις

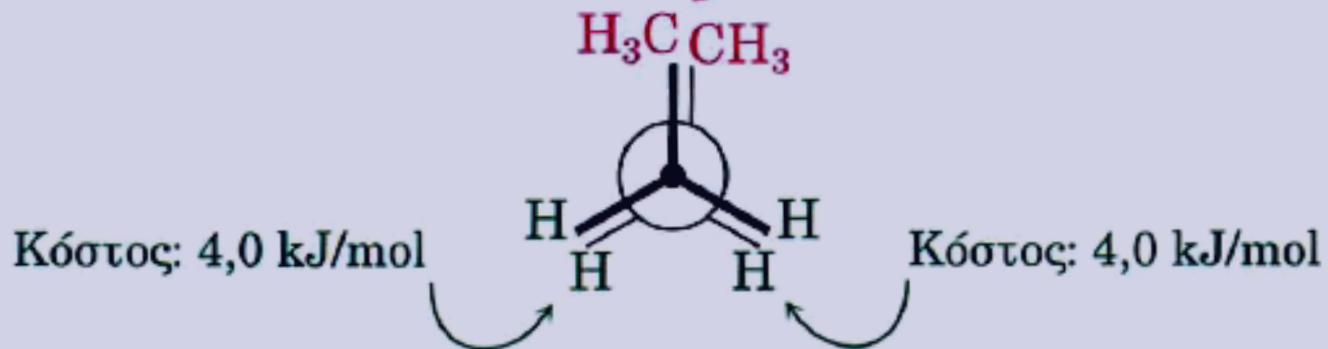
Συνολικό κόστος: 16 kJ/mol

Κόστος: 6,0 kJ/mol

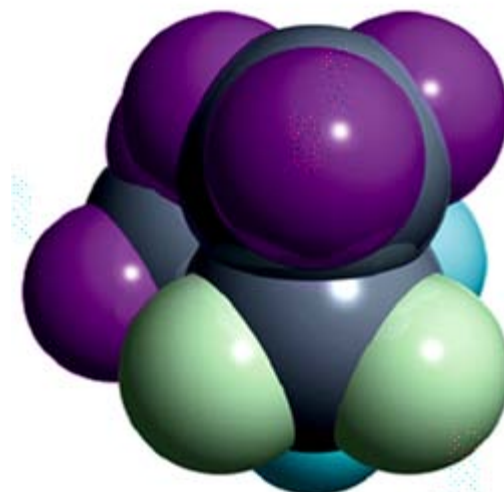
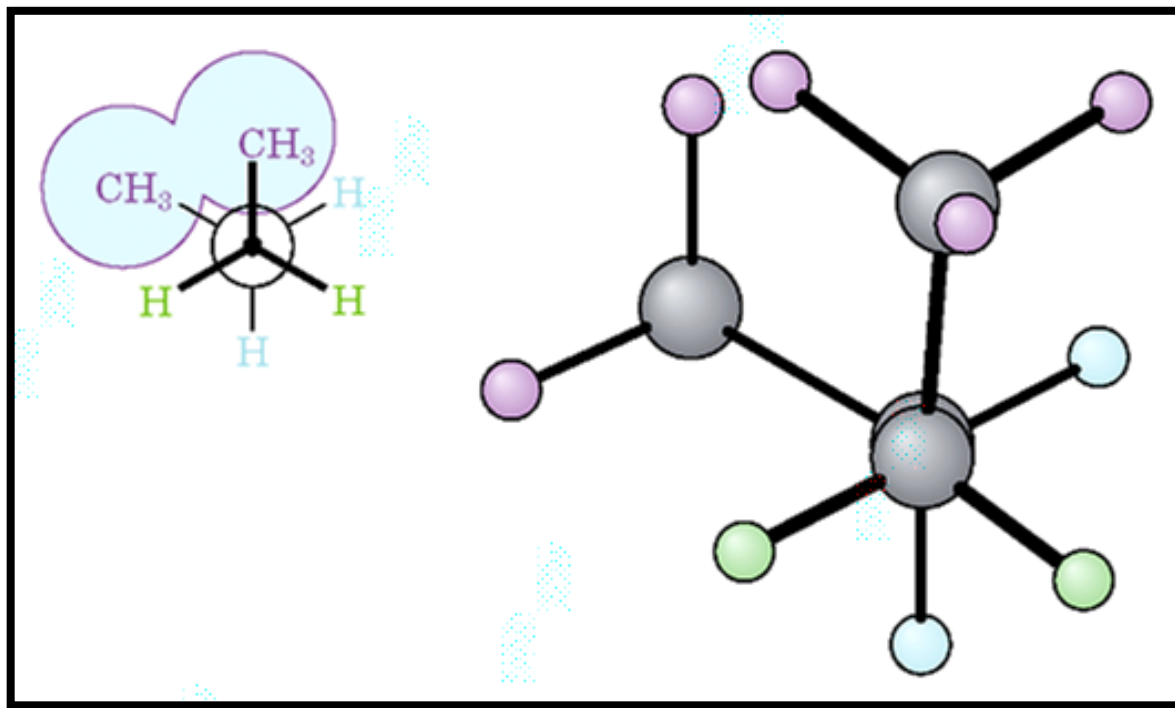


Συνολικό κόστος: 19 kJ/mol

Κόστος: 11 kJ/mol



Διαμόρφωση gauche



Ενεργειακό κόστος λόγω απώσεων

Αλληλεπίδραση	Αιτία	Ενεργειακό κόστος	
		(kJ/mol)	(kcal/mol)
Εκλειπτική H↔H	Τάση στρέψης	4,0	1,0
Εκλειπτική H↔CH ₃	Κυρίως τάση στρέψης	6,0	1,4
Εκλειπτική CH ₃ ↔CH ₃	Τάση στρέψης και στεreoχημική τάση	11	2,6
Gauche CH ₃ ↔CH ₃	Στεreoχημική τάση	3,8	0,9

Η πιο σταθερή διαμόρφωση ενός αλκανίου είναι εκείνη, στην οποία οι δεσμοί C-C είναι διαβαθμισμένοι και οι μεγάλοι υποκαταστάτες βρίσκονται σε θέση αντι ο ένας ως προς τον άλλο.

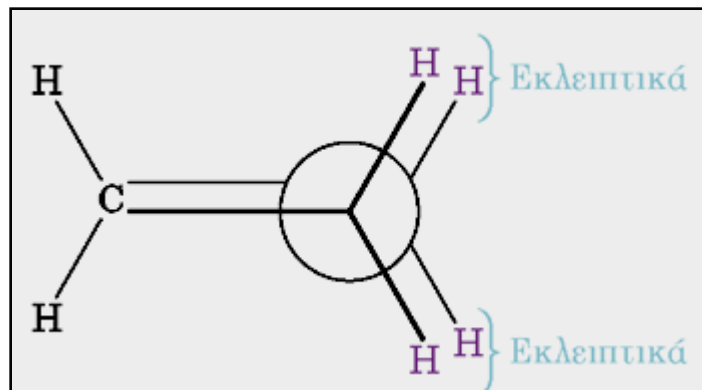
Σε δεδομένη στιγμή, όμως, μεγαλύτερο ποσοστό μορίων θα βρίσκεται σε κάποια σταθερότερη διαμόρφωση, απ' ό,τι σε κάποια λιγότερο σταθερή.

ΚΥΚΛΟΑΛΚΑΝΙΑ

Υιοθέτηση διαμορφώσεων χαμηλής ενέργειας

Τα κυκλοαλκάνια υιοθετούν τις διαμορφώσεις χαμηλής ενέργειας για τρεις λόγους :

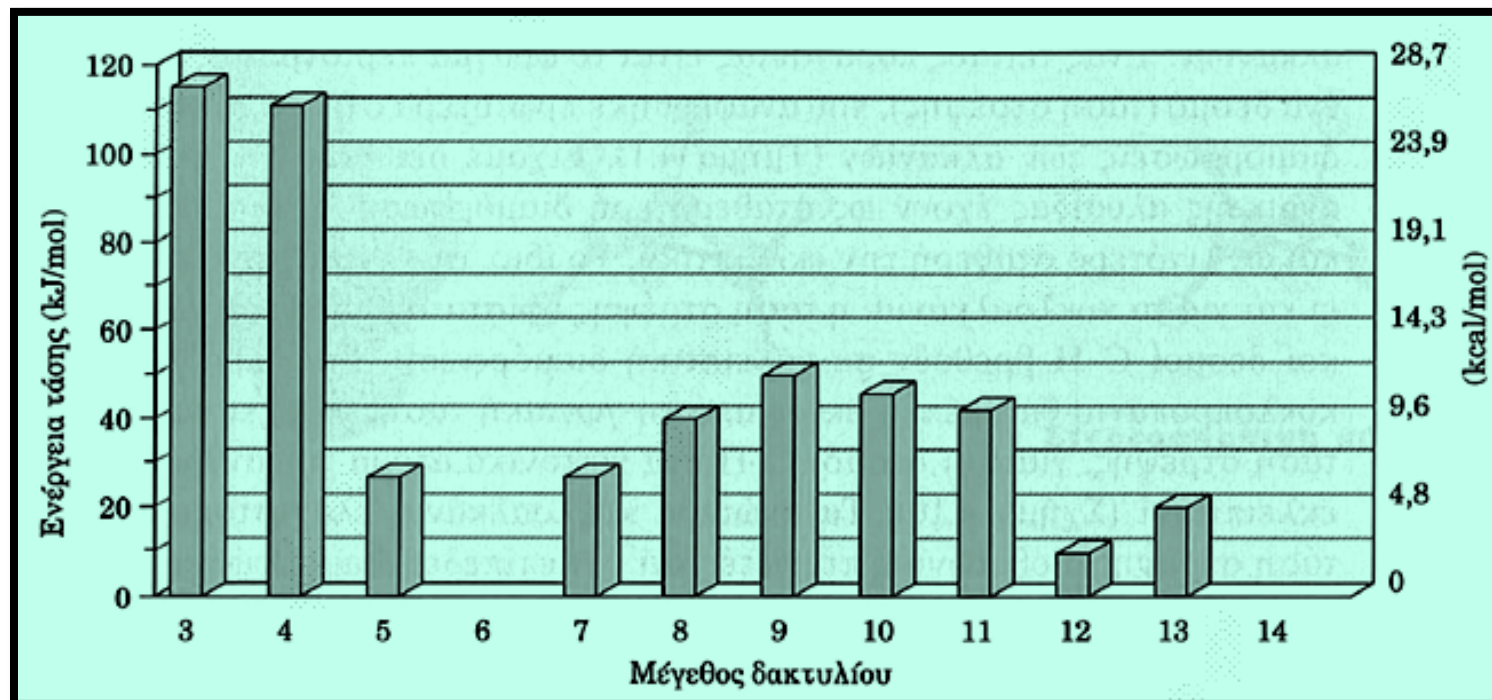
- 1) Εξαιτίας της **γωνιακής τάσης**, δηλαδή της τάσης που αναπτύσσεται όταν οι γωνίες των δεσμών μεγαλώνουν ή συμπιέζονται.
- 2) Εξαιτίας της **τάσης στρέψης**, δηλαδή της τάσης που αναπτύσσεται λόγω της εκλειπτικής διαμόρφωσης των δεσμών σε γειτονικά άτομα.
- 3) Εξαιτίας της **στερεοχημικής τάσης**, δηλαδή της τάσης που αναπτύσσεται λόγω των απωστικών αλληλεπιδράσεων που εκδηλώνονται όταν τα άτομα προσεγγίζουν το ένα το άλλο .



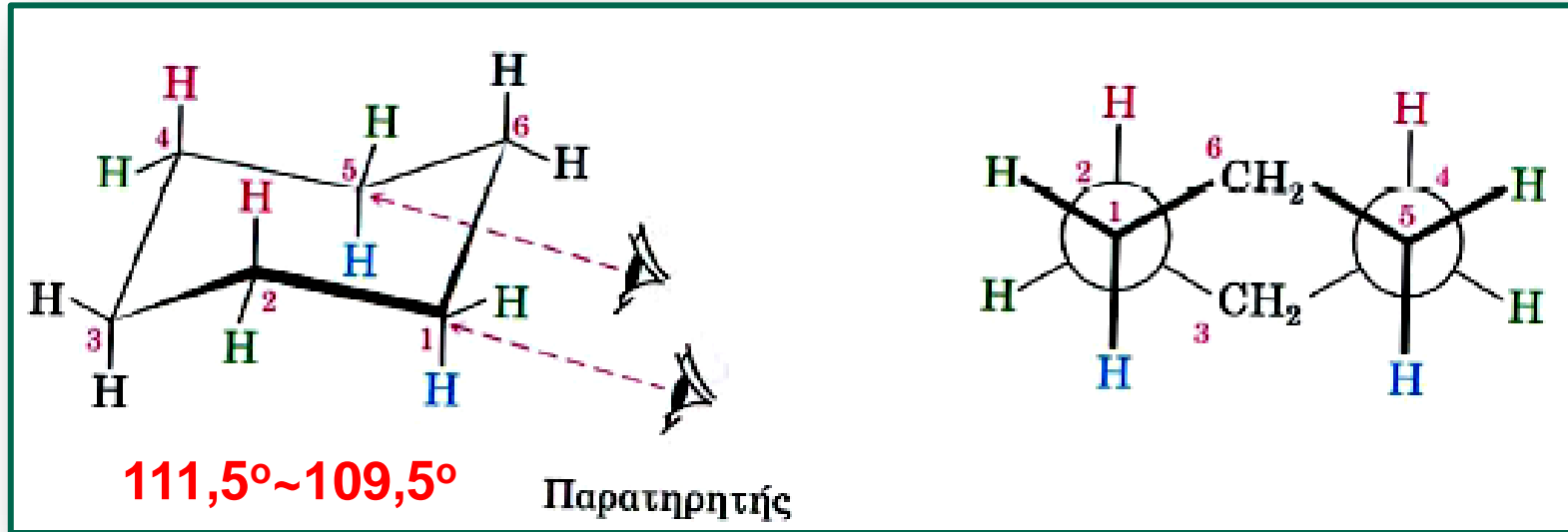
Η ενέργεια τάσης των κυκλοαλκανίων

Τα περισσότερα κυκλοαλκάνια δεν είναι επίπεδα

Υιοθετούν κατάλληλες διαμορφώσεις στο χώρο, οι οποίες επιτρέπουν στις γωνίες των δεσμών να είναι σχεδόν τετραεδρικές.



Διαμορφώσεις του κυκλοεξανίου



Τα υποκατεστημένα κυκλοεξάνια απαντούν συχνά στα φυσικά προϊόντα

Το κυκλοεξάνιο δεν είναι επίπεδο, υιοθετεί μια κατάλληλα πτυχωμένη διαμόρφωση στο χώρο (Διαμόρφωση ανάκλιντρου)
Στη διαμόρφωση αυτή εξουδετερώνονται όλες οι τάσεις και έτσι το κυκλοεξάνιο δεν εμφανίζει τάση (γωνιακή τάση, τάση στρέψης).

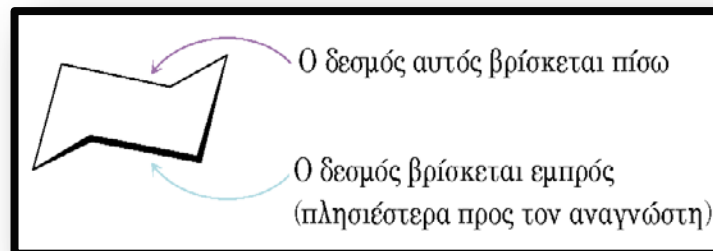
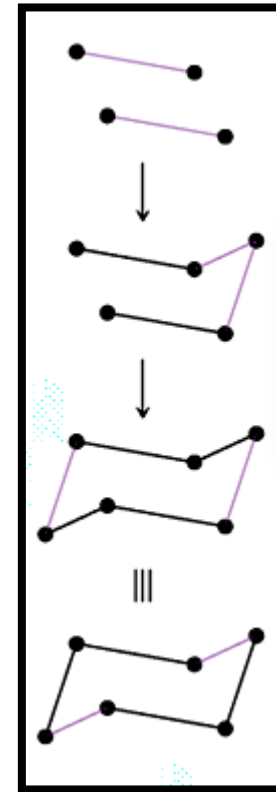
Από τις προβολές κατά Newman, γίνεται φανερό ότι στη διαμόρφωση ανάκλιντρου όλοι οι γειτονικοί δεσμοί C-H έχουν διαβαθμισμένη διαμόρφωση και έτσι δεν υφίσταται καθόλου τάση στρέψης

Σχεδιασμός της διαμόρφωσης του ανάκλιντρου στο κυκλοεξάνιο

Σχεδιάστε δύο παράλληλες γραμμές, ελαφρά κεκλιμένες προς τα κάτω που να μην ξεκινούν από την ίδια κατακόρυφο. Αυτό σημαίνει ότι οι τέσσερις από τους άνθρακες του κυκλοεξαίνιου βρίσκονται στο ίδιο επίπεδο.

Τοποθετήστε τον πέμπτο άνθρακα πάνω και δεξιά, σε σχέση με το επίπεδο που ορίζουν οι υπόλοιποι τέσσερις, και συνδέστε τους δεσμούς.

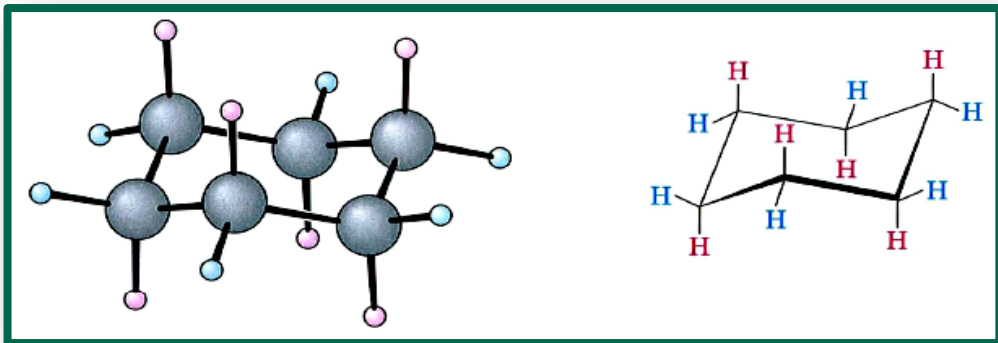
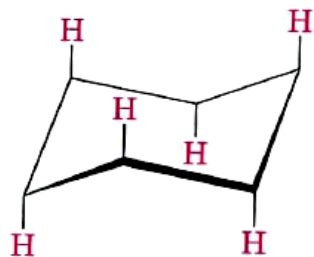
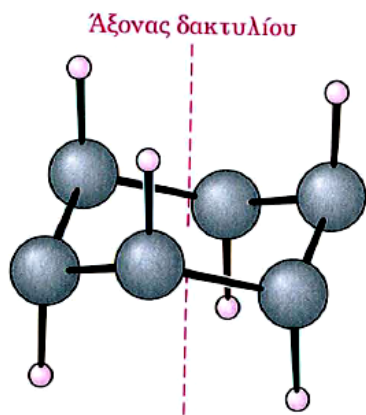
Τοποθετήστε τον τελευταίο άνθρακα κάτω και αριστερά, σε σχέση με το αρχικό επίπεδο, και συνδέστε όλους τους δεσμούς. Παρατηρήστε ότι οι δεσμοί που βρίσκονται απέναντι είναι μεταξύ τους παράλληλοι.



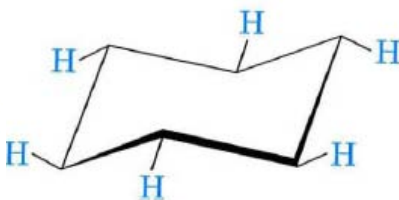
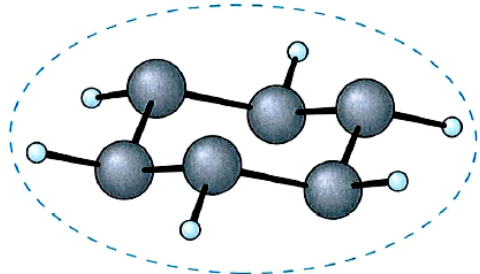
Αξονικοί και ισημερινοί δεσμοί στο κυκλοεξάνιο

Μια επίπτωση της διαμορφωσης του ανάκλιντρου είναι ότι υπάρχουν δύο ειδών διατάξεις για τα άτομα του υδρογόνου στο δακτύλιο:

οι **αξονικές** (a, axial) και
οι **ισημερινές** (e, equatorial)



Ισημερινός δακτυλίου

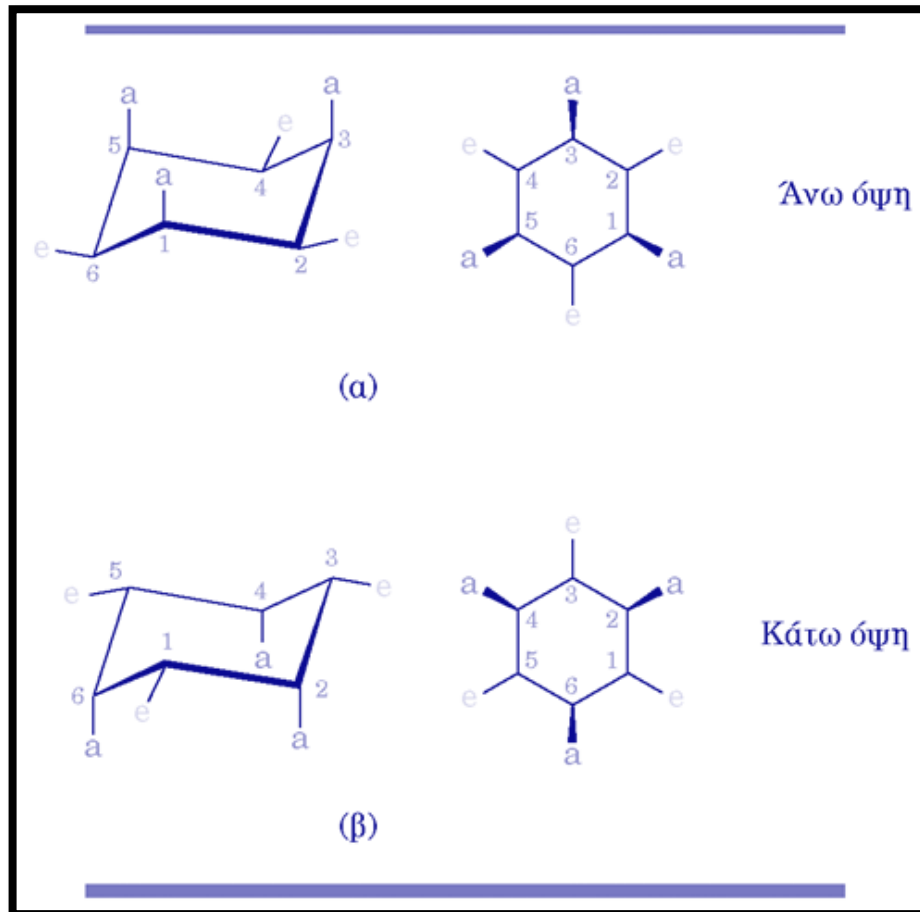


Το κυκλοεξάνιο, στη διαμόρφωση ανάκλιντρου έχει:

Έξι αξονικά υδρογόνα, διατεταγμένα κάθετα στο δακτύλιο
(παράλληλα προς τον ,αξονά του δακτυλίου)
και

Έξι ισημερινά υδρογόνα, διατεταγμένα περίπου στο επίπεδο του δακτυλίου
(γύρω από τον ισημερινό του).

Διαμορφώσεις του κυκλοεξανίου



Κάθε άτομο άνθρακα έχει μια
αξονική και μια ισημερινή θέση
Κάθε πλευρά έχει
εναλλασσόμενες αξονικές και
ισημερινές θέσεις

ΔΙΥΠΟΚΑΤΕΣΤΗΜΕΝΑ

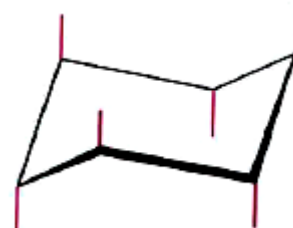
Διαμορφώσεις κυκλοεξανίου

	<u>cis</u>	<u>trans</u>
1,2	(<u>α,ι</u>)(<u>ι,α</u>)	(<u>α,α</u>) (<u>ι,ι</u>)
1,3	(<u>α,α</u>) (<u>ι,ι</u>)	(<u>α,ι</u>)(<u>ι,α</u>)
1,4	(<u>α,ι</u>)(<u>ι,α</u>)	(<u>α,α</u>) (<u>ι,ι</u>)

α:αξονικό ι: ισημερινό

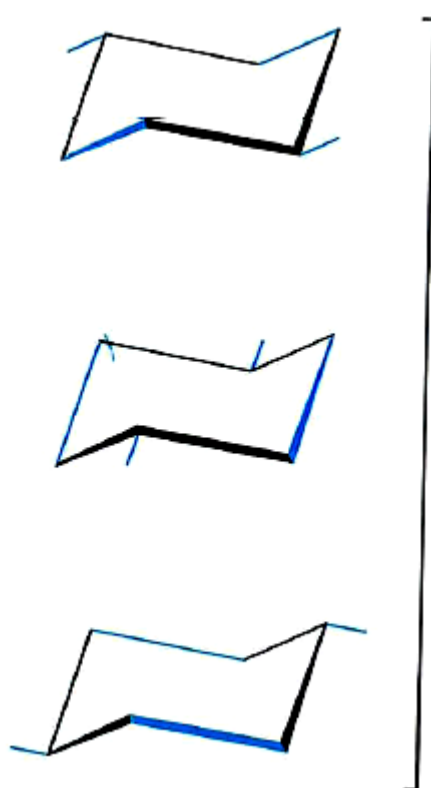
Σχεδιασμός αξονικών και ισημερινών δεσμών στη διαμόρφωση ανάκλιντρου στο κυκλοεξάνιο

Αξονικοί Δεσμοί: Οι έξι αξονικοί δεσμοί, ένας σε κάθε άνθρακα, είναι παράλληλοι και εναλλασσόμενοι προς τα άνω και προς τα κάτω.

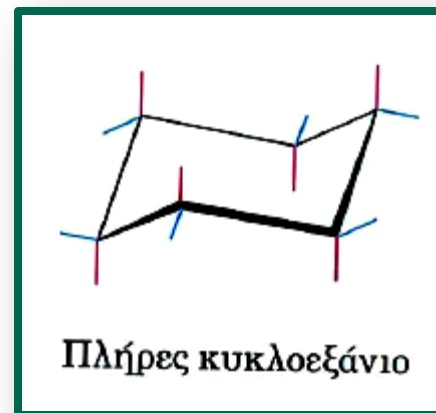


Αξονικοί δεσμοί

Ισημερινοί Δεσμοί: Οι έξι ισημερινοί δεσμοί, ένας σε κάθε άνθρακα, μπορούν να σχεδιαστούν σε τρεις ομάδες δύο παράλληλων γραμμών. Κάθε ομάδα ισημερινών δεσμών είναι επίσης παράλληλη με δύο δεσμούς του δακτυλίου. Οι ισημερινοί δεσμοί έχουν εναλλασσόμενη κατεύθυνση ως προς τις δύο επιφάνειες γύρω από το δακτύλιο.



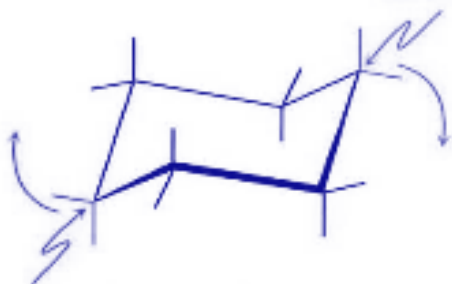
Ισημερινοί δεσμοί



Πλήρες κυκλοεξάνιο

Αναστροφή του δακτυλίου (ring-flip)

Μετακινήστε αυτόν τον άνθρακα
προς τα κάτω



Μετακινήστε αυτόν
τον άνθρακα προς τα πάνω

↑↓ Αναστροφή
δακτυλίου



Η αναστροφή δακτυλίου στη
διαμόρφωση ανάκλιντρου στο
κυκλοεξάνιο αλληλομετατρέπει
αξονικές και ισημερινές θέσεις.

Τα αξονικά μετατρέπονται
σε ισημερινά και τα ισημερινά
σε αξονικά

$\alpha \rightarrow \text{ισ}$

$\text{ισ} \rightarrow \alpha$

Ένας υποκαταστάτης είναι πάντοτε πιο σταθερός
σε ισημερινή θέση απ' ό,τι σε αξονική.

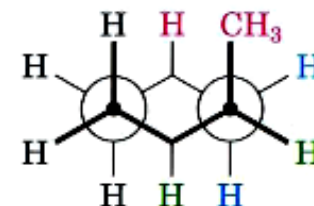
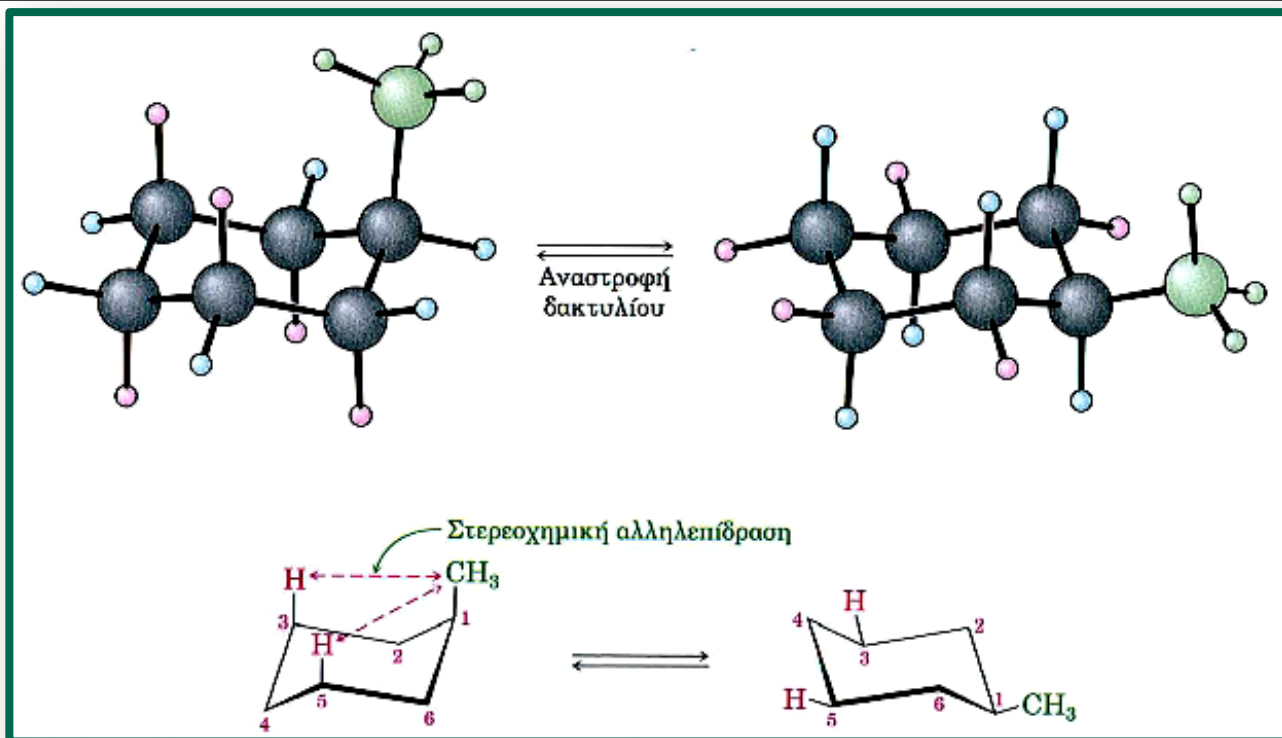
1,3-διαξονικές αλληλεπιδράσεις στα υποκατεστημένα κυκλοεξάνια

1,3-διαξονικές αλληλεπιδράσεις

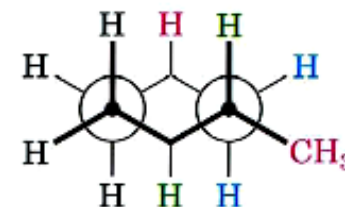
Αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στον αξονικό υποκαταστάτη του C_1 και τα αξονικά υδρογόνα των ανθράκων C_3 και C_5 , που βρίσκονται πολύ κοντά

Το ακριβές μέγεθος της 1,3-διαξονικής στερεοχημικής τάσης σε μια συγκεκριμένη ένωση εξαρτάται από τη φύση και το μέγεθος του αξονικού υποκαταστάτη.

Ένας υποκαταστάτης είναι πάντοτε πιο σταθερός σε ισημερινή θέση απ'ό,τι σε αξονική



Αξονικό μεθυλοκυκλοεξάνιο (τάση 7,6 kJ/mol)

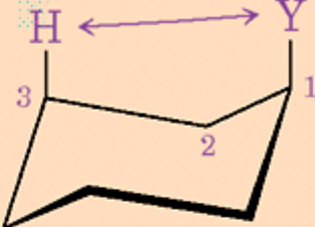


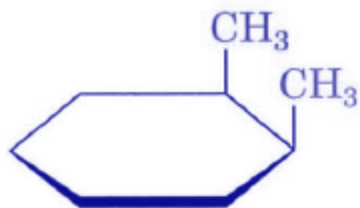
Ισημερινό μεθυλοκυκλοεξάνιο (δεν υπάρχει στερεοχημική τάση)

Πίνακας 4.2 Η στερεοχημική τάση σε μονοϋποκατεστημένα κυκλοεξάνια.

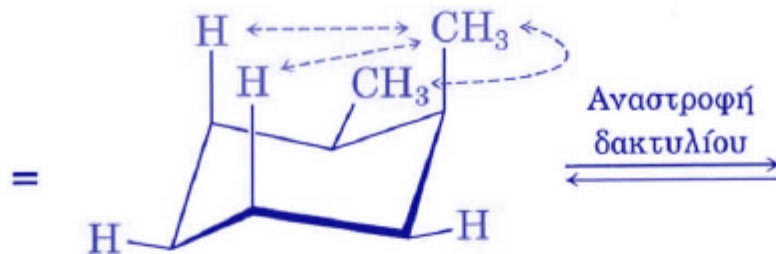
Y	Τάση της 1,3-διαξονικής αλληλεπίδρασης H-Y		
	(kJ/mol)	(kcal/mol)	
-F	0,5	0,12	
-Cl	1,0	0,25	
-Br	1,0	0,25	
-OH	2,1	0,5	
-CH ₃	3,8	0,9	
-CH ₂ CH ₃	4,0	0,95	
-CH(CH ₃) ₂	4,6	1,1	
-C(CH ₃) ₃	11,4	2,7	
-C ₆ H ₅	6,3	1,5	
-COOH	2,9	0,7	
-CN	0,4	0,1	

Στεreoχημική τάση Μονουποκατεστημένα κυκλοεξάνια

Y	Τάση της 1,3-διαξονικής αλληλεπίδρασης H-Y		
	(kJ/mol)	(kcal/mol)	
- F	0,5	0,12	
- Cl	1,0	0,25	
- Br	1,0	0,25	
- OH	2,1	0,5	
- CH ₃	3,8	0,9	
- CH ₂ CH ₃	4,0	0,95	
- CH(CH ₃) ₂	4,6	1,1	
- C(CH ₃) ₃	11,4	2,7	
- C ₆ H ₅	6,3	1,5	
- COOH	2,9	0,7	
- CN	0,4	0,1	



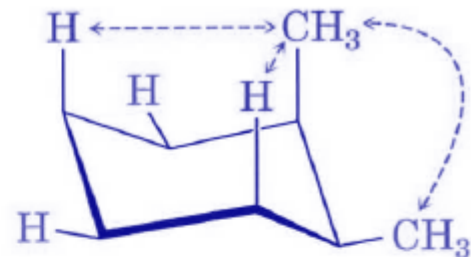
**cis-1,2-
Διμεθυλοκυκλο-
εξάνιο**



Αλληλεπίδραση τύπου gauche
(3,8 kJ/ml)

Δύο διαξονικές αλληλεπιδράσεις CH₃-H
(7,6 kJ/mol)

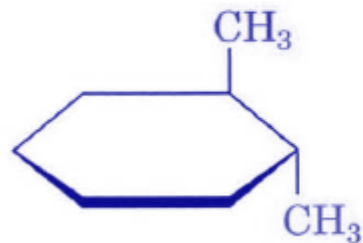
**Συνολική τάση:
3,8 + 7,6 = 11,4 kJ/mol**



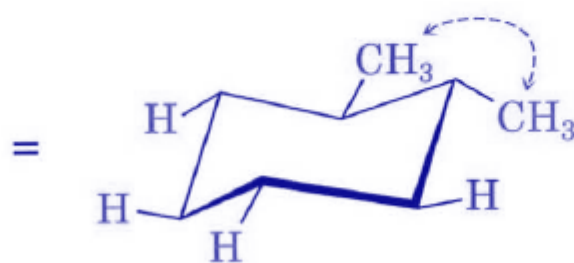
Αλληλεπίδραση τύπου gauche
(3,8 kJ/ml)

Δύο διαξονικές αλληλεπιδράσεις
CH₃-H (7,6 kJ/mol)

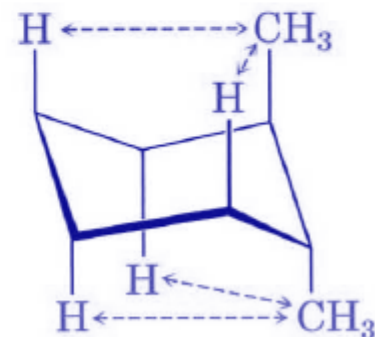
**Συνολική τάση:
3,8 + 7,6 = 11,4 kJ/mol**



**trans-1,2-Διμεθυλο-
κυκλοεξάνιο**



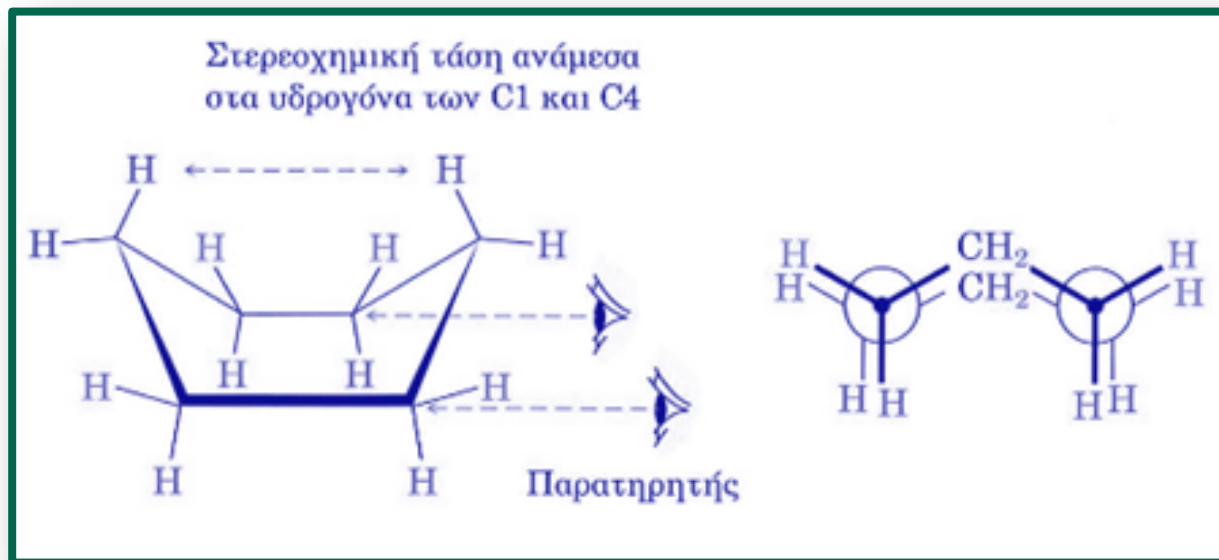
Μια αλληλεπίδραση τύπου
gauche (3,8 kJ/ml)



Τέσσερις διαξονικές
αλληλεπιδράσεις CH₃-H
(15,2 kJ/mol)

Η διαμόρφωση λουτήρα στο κυκλοεξάνιο

Εκτός από τη διαμόρφωση ανακλίντρου, το κυκλοεξάνιο απαντά και με μια δεύτερη διαμόρφωση που δεν εμφανίζει καθόλου γωνιακή τάση η οποία ονομάζεται διαμόρφωση λουτήρα που είναι λιγότερο σταθερή από την αντίστοιχη του ανάκλιντρου

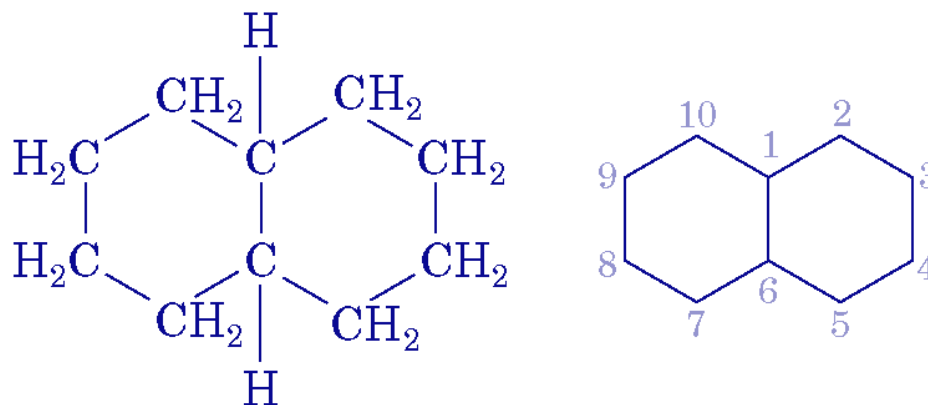


Στη διαμόρφωση λουτήρα υπάρχουν δύο «είδη» ατόμων άνθρακα. Οι άνθρακες 2, 3, 5 και 6 ορίζουν ένα επίπεδο, ενώ οι άνθρακες 1 και 4 βρίσκονται πάνω από το επίπεδο.

Διαμορφώσεις πολυκυκλικών μορίων

Πολυκυκλικό μόριο

Δύο ή περισσότεροι κυκλοαλκανικοί ενώνονται με δυο κοινά άτομα άνθρακα
«συμπυκνώνονται»



Δεκαλίνιο (δύο συμπυκνωμένοι κυκλοεξανικοί δακτύλιοι)

Ισομερή δεκαλινίου

Το δεκαλίνιο μπορεί να υπάρξει σε δύο ισομερείς μορφές, ανάλογα με το αν οι δακτύλιοι είναι συμπυκνωμένοι σε *trans* ή *cis* διάταξη.

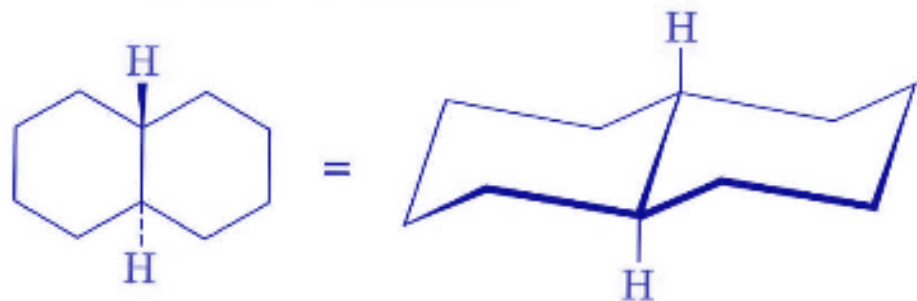
Στο *trans*-δεκαλίνιο, τα άτομα του υδρογόνου στους άνθρακες της γέφυρας είναι προσανατολισμένα προς τις αντίθετες πλευρές των δακτυλίων.

Στο *cis*-δεκαλίνιο, τα ίδια υδρογόνα προσανατολίζονται προς την ίδια πλευρά.

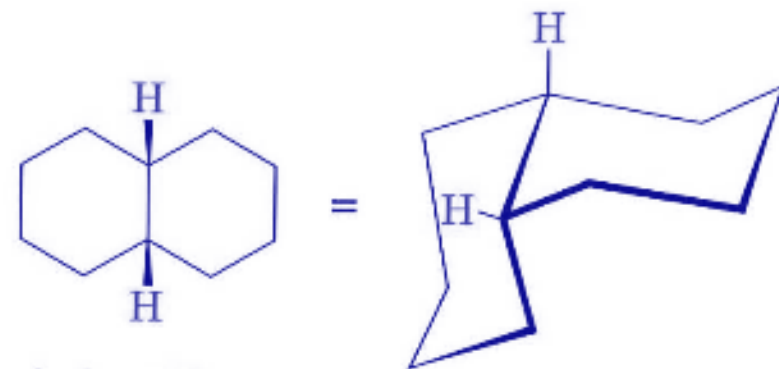
Διαμορφώσεις κυκλοεξανίου

	<i>cis</i>	<i>trans</i>
1,2	(<u>α,ι</u>)(<u>ι,α</u>)	(<u>α,α</u>)(<u>ι,ι</u>)
1,3	(<u>α,α</u>)(<u>ι,ι</u>)	(<u>α,ι</u>)(<u>ι,α</u>)
1,4	(<u>α,ι</u>)(<u>ι,α</u>)	(<u>α,α</u>)(<u>ι,ι</u>)

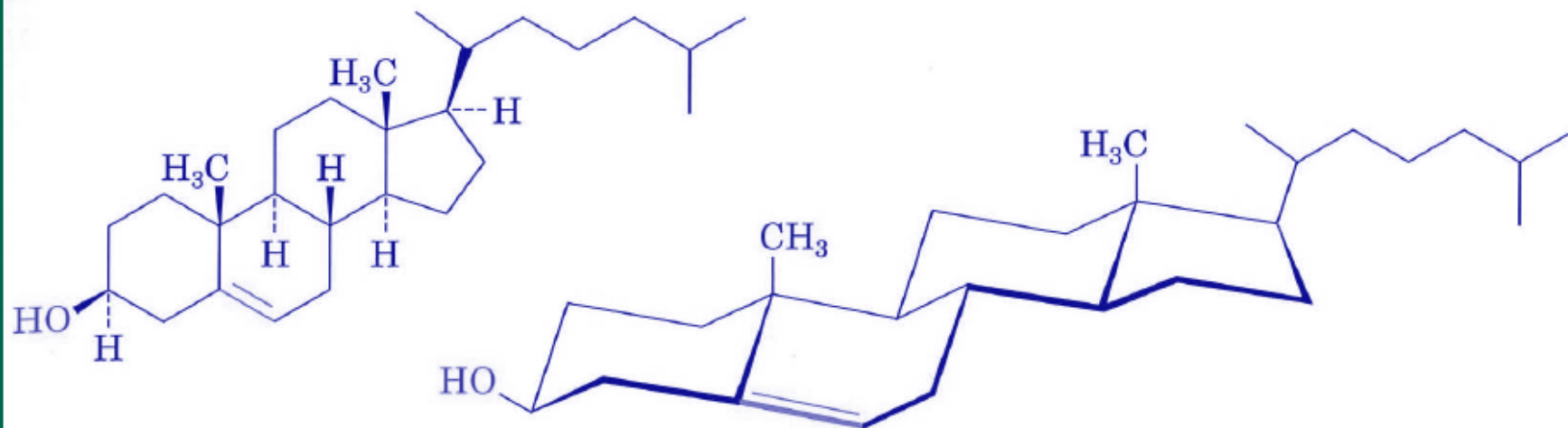
α: αξονικό ι: ισημερινό



trans-Δεκαλίνιο



cis-Δεκαλίνιο



Χοληστερόλη (ένα στεροειδές)