

## Vorlesung 5. Alkane

Verbindungen aus Kohlenstoff und Wasserstoff, die nur Einfachbindungen enthalten, nennt man gesättigte Kohlenwasserstoffe. Sie sind ein Hauptbestandteil von Erdgas und Erdöl.

Liegen auch Doppel- oder Dreifachbindungen vor, spricht man von ungesättigten Kohlenwasserstoffen. Sie werden später besprochen.

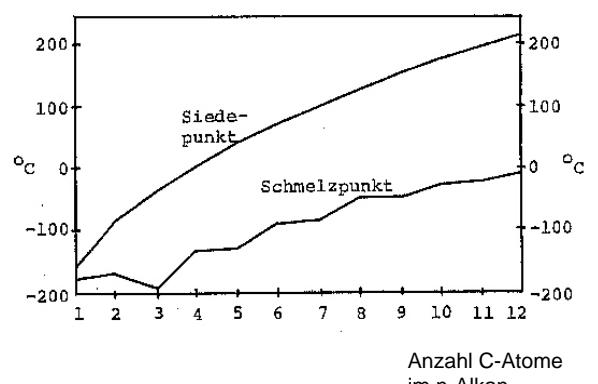
Bei den gesättigten Kohlenwasserstoffen unterscheidet man unverzweigte Alkane ( $C_nH_{2n+2}$ ), verzweigte Alkane ( $C_nH_{2n+2}$ ), Cycloalkane ( $C_nH_{2n}$ ) Bicycloalkane ( $C_nH_{2n-2}$ ), und Polycycloalkane.

Die Summenformeln ergeben sich aus den bereits kennen gelernten Regeln, dass Wasserstoff die Heliumschale anstrebt (d. h. 1-bindig ist) und Kohlenstoff die Neonschale anstrebt (d. h. vierbindig ist).

Diskussion der *n*-Alkane (unverzweigte Alkane) anhand von *Vollhardt*, 3. Aufl., S. 52, Tab. 2-3, 4. Aufl., S. 73, Tab. 2-5 bzw. *Hart*, Tab. 2.1 oder *Buddrus*, S. 66.

Homologe Reihe bezeichnet eine Reihe von Verbindungen, die sich durch ein konstantes Glied unterscheiden, hier die  $CH_2$ -Gruppe.

|                |                  |                          |                     |
|----------------|------------------|--------------------------|---------------------|
| $CH_4$         | Methan           | Sdp. $\sim -161^\circ C$ | Smp. $-182^\circ C$ |
| $C_2H_6$       | Ethan            | -88                      | $\sim 172$          |
| $C_3H_8$       | Propan           | -42                      | $\sim 187$          |
| $C_4H_{10}$    | <i>n</i> -Butan  | -0,5                     | $\sim 135$          |
| $C_5H_{12}$    | <i>n</i> -Pentan | 36                       | $\sim 129$          |
| $C_6H_{14}$    | <i>n</i> -Hexan  | 68                       | $\sim 94$           |
| $C_7H_{16}$    | <i>n</i> -Heptan | 98                       | $\sim 90$           |
| $C_8H_{18}$    | <i>n</i> -Octan  | 125                      | $\sim 56$           |
| $C_9H_{20}$    | <i>n</i> -Nonan  | 150                      | $\sim 53$           |
| $C_{10}H_{22}$ | <i>n</i> -Decan  | 174                      | $\sim 29$           |



*n*-Alkane mit  $C_1$ - $C_4$  sind Gase,  $C_5$ - $C_{16}$  bzw.  $C_{17}$  sind Flüssigkeiten, höhere *n*-Alkane sind Feststoffe. Regelmäßiger Anstieg der Siedepunkte und zickzackförmiger Anstieg der Schmelzpunkte.

Zwischen Dipolmolekülen bestehen stärkere Anziehungskräfte als zwischen den unpolaren Kohlenwasserstoff-Molekülen. Da für die Trennung von unpolaren Molekülen voneinander somit weniger Energie benötigt wird, besitzen Alkane niedrigere Siedepunkte als polare Verbindungen ähnlicher Molekulmasse.

Warum ziehen sich auch die unpolaren Alkan-Moleküle gegenseitig an? Demonstration der London-Kräfte, d. h. der Wechselwirkung zwischen „augenblicklich induziertem Dipol“ (engl. instantaneous induced dipole) und induziertem Dipol durch Video-Animation aus Solomons. London-Kräfte sind somit ein Spezialfall der van-der-Waals-Kräfte, womit alle anziehenden intermolekularen Kräfte bezeichnet werden.

Der unregelmäßige Anstieg der Schmelzpunkte der n-Alkane ist durch die Einordnung im Kristallgitter bedingt. Verzweigte Moleküle haben manchmal sehr dichte Packung und daher höhere Schmelzpunkte. Die Voraussage von Schmelzpunkten ist schwierig!

**Demonstration** der geringen Dichte von gasförmigem Methan durch Methan-Seifenblasen. Warum steigen sie nach oben?

$$16 \text{ g Methan} \triangleq 22.4 \text{ L}$$

$$\rho = \frac{16 \text{ g}}{22.4 \text{ L}} = 0.71 \frac{\text{g}}{\text{L}} ; \text{ vergleiche mit der Dichte von Luft!}$$

### Verzweigte Alkane

Zu der Summenformel  $\text{C}_4\text{H}_{10}$  können Sie zwei Strukturformeln angeben.

n-Butan

Isobutan

Isomere haben dieselbe Summenformel, aber unterschiedliche Struktur.

Butan und Isobutan sind Konstitutionsisomere (früher: Strukturisomere), weil sie unterschiedliche Konstitution (d. h. verschiedene Atomsequenz bzw. verschiedene Konspektivität) besitzen.

Zur Summenformel  $\text{C}_5\text{H}_{12}$  gibt es bereits drei Konstitutionsisomere

n-Pentan

Isopentan

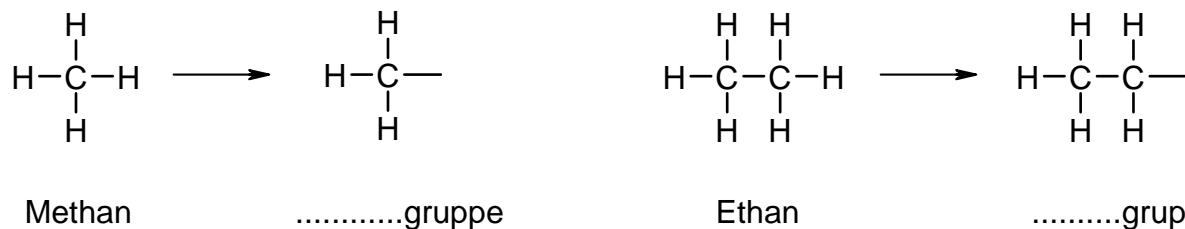
Neopentan

**Kennzeichnung** primärer, sekundärer und tertiärer Wasserstoffatome sowie quartärer Kohlenstoffe in den vorher diskutierten Strukturen

Dramatische Zunahme der Zahl der Konstitutionsisomeren mit Molekulgröße (*Vollhardt, 3. Aufl., Tab. 2.3, 4. Aufl., Tab. 2.1; Hart, Tab. 2.1; Buddrus, S. 65*)

**Systematische Nomenklatur** (Vollhart, 3. Aufl., S. 51-56, 4. Aufl., S. 72-78; Hart, S. 48-55; Buddrus, S. 67/68)

Durch Abtrennen eines Wasserstoffatoms aus einem Alkan erhält man eine Alkylgruppe



Substituenten sind alle Gruppen, die Wasserstoff in den Stammverbindungen ersetzen (hier Methylgruppe, Ethylgruppe, aber auch alle anderen Atome und Atomgruppierungen)

### Regeln für die Nomenklatur verzweigter Alkane

#### Regel 1

Suchen Sie die längste Kette von Kohlenstoffatomen im Molekül und benennen Sie sie.

#### Regel 2

Bestimmen Sie die Namen der an die längste Kette gebundenen Alkylgruppen.

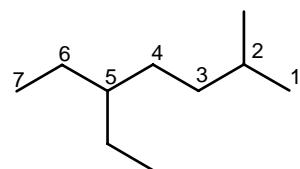
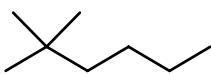
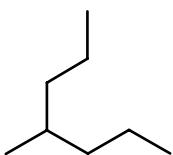
#### Regel 3

Nummerieren Sie die Kohlenstoffatome der längsten Kette von dem Ende her, das einem Substituenten am nächsten ist.

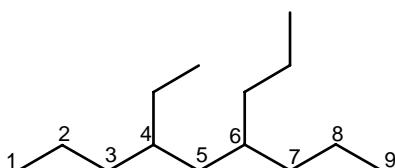
#### Regel 4

Ordnen Sie die Namen der Seitenketten in alphabetischer Reihenfolge und verknüpfen Sie die Seitenketten mit dem Stammalkan. Geben Sie vor dem Namen der Seitenkette die Nummer des C-Atoms des Stammalkans an, an das die Seitenkette gebunden ist.

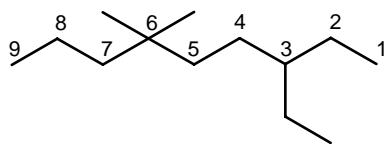
Diese Regeln sollen nun angewendet werden, um die vorher mit Trivialnamen bezeichneten Verbindungen systematisch zu benennen.



(Methyl steht näher am Kettenanfang)



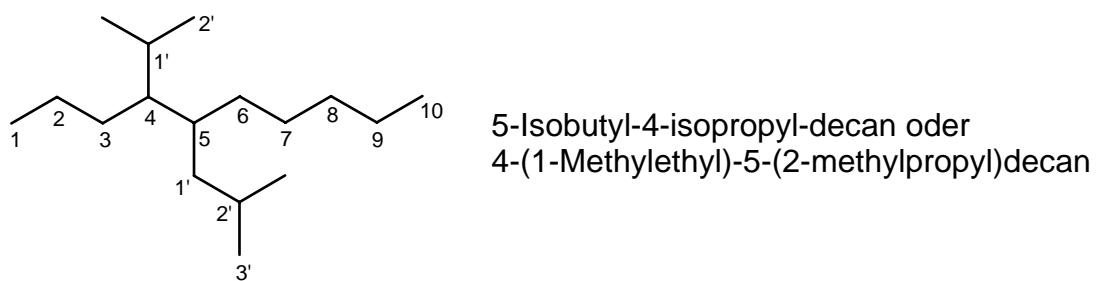
(Alphabet entscheidet Nummerierung)



"E" vor "m"; Präfix "d" zählt nicht

## Benennung verzweigter Alkylgruppen

| Struktur   | Trivialname | systematischer Name |
|--|-------------|---------------------|
| $  \begin{array}{c}  \text{CH}_3 \\    \\  \text{H}_3\text{C}-\text{C}- \\    \\  \text{H}  \end{array}  $                                   | Isopropyl   | 1-Methylethyl       |
| $  \begin{array}{c}  \text{CH}_3 \\    \\  \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{C}- \\    \quad   \\  \text{H} \quad \text{H}_2  \end{array}  $ | Isobutyl    | 2-Methylpropyl      |
| $  \begin{array}{c}  \text{H} \\    \\  \text{H}_3\text{C}-\text{C}- \\    \\  \text{CH}_2 \\    \\  \text{CH}_3  \end{array}  $             | sec-Butyl   | 1-Methylpropyl      |
| $  \begin{array}{c}  \text{CH}_3 \\    \\  \text{H}_3\text{C}-\text{C}- \\    \\  \text{CH}_3  \end{array}  $                                | tert-Butyl  | 1,1-Dimethylethyl   |



*Hinweis:* Die Namensgebung komplizierter Verbindungen, wie der eben genannten, übernehmen heute Computerprogramme. Es genügt daher, das Prinzip zu kennen, um einem gegebenen Namen eine Struktur zuordnen zu können.

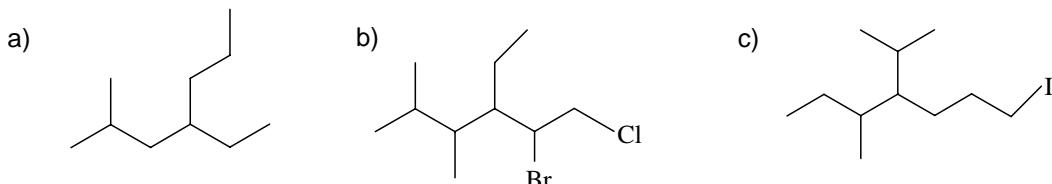
**Übungen A5-1.** Zeichnen Sie die Strukturformeln folgender Verbindungen:

- a) 2-Brom-3-chlor-4-iodpentan;
- b) 4-Ethyl-1-iod-3-(1-methylethyl)hexan;
- c) 2-Brom-4-fluor-2,4-dimethylpentan

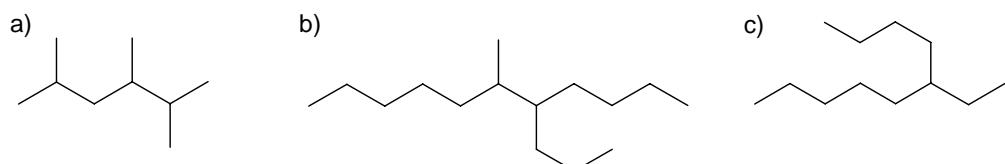
**Übungen B5-1.** Zeichnen Sie die Strukturformeln folgender Verbindungen:

- a) 5-*tert*-Butyl-nanon bzw. 5-(1,1-Dimethylethyl)-nonan;
- b) 3-Ethyl-4-isopropyl-heptan bzw. 3-Ethyl-4-(1-methylethyl)-heptan;
- c) 6-(1-Methylbutyl)-8-(2-methylbutyl)tridecan;

**Übungen A5-2.** Benennen Sie folgende Verbindungen nach der IUPAC-Nomenklatur:



**Übungen B5-2.** Benennen Sie folgende Verbindungen nach der IUPAC-Nomenklatur



### Struktur und physikalische Eigenschaften der Alkane

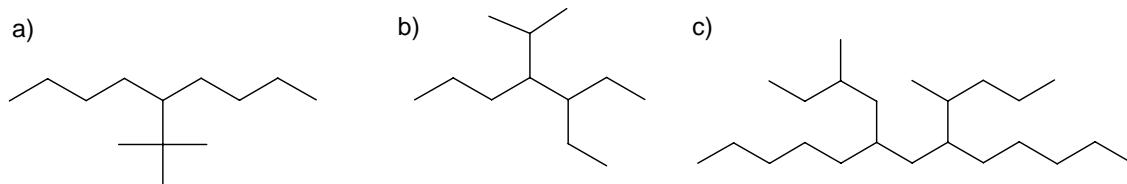
(Vollhardt, 3. Aufl., S. 56-59, 4. Aufl. S. 78-82; Hart, S. 56-57; Budrus, S. 72-73)

Video-Animation aus Solomons zur Erklärung warum *n*-Alkane (Pantan, Sdp. 36 °C) höhere Siedepunkte besitzen als die isomeren verzweigten Alkane (Neopantan, Sdp. 10 °C)

Die unpolaren Alkane sind lipophil und hydrophob: Video-Animation zeigt, dass die Wasser-Moleküle sich gegenseitig anziehen und Kohlenwasserstoffmoleküle verdrängen, so dass es zur Phasentrennung kommt.

Die Natur nutzt die geringe Mischbarkeit von Wasser und Alkanen: Pflanzen schützen sich beispielsweise durch Wachsschicht (z. B. C<sub>29</sub>H<sub>60</sub>) auf der Blattoberfläche vor Wasserverlust.

### Lösung zu Übungen B5-1.



### Lösung zu Übungen B5-2.

- a) 2,3,5-Trimethylhexan
- b) 6-Methyl-5-propylundecan
- c) 5-Ethyl-decan