

Química Orgânica I
Profa. Dra. Alcení Augusta Werle
Profa. Dra. Tania Márcia do Sacramento Melo

ESTUDO DOS ALCANOS

Aula nº5

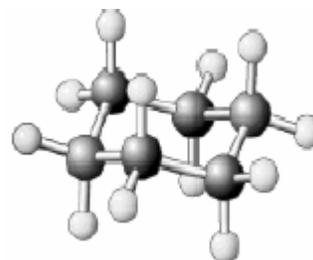
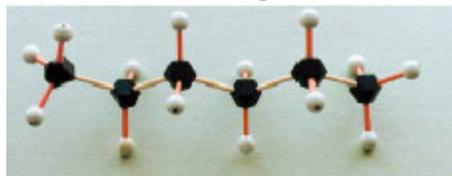


1- Definição

Os alcanos são uma classe de compostos formados unicamente por carbono e hidrogênio.

- i) Hidrocarbonetos alifáticos;
- ii) Pouco reativos
- iii) Compostos Saturados
- iv) Moléculas desprovidas de grupo funcional
- v) moléculas apolares

- **As estruturas destes compostos podem ser acíclicas (cadeias abertas lineares ou ramificadas) ou cíclicas.**



2- Fórmula geral e ocorrência natural

- (C_nH_{2n+2}) , onde **n** representa o número de carbonos na cadeia.
- O **metano**: produto de decomposição anaeróbica de vegetais causada por bactérias em ambientes redutores. Também é produzido pelo sistema digestivo dos cupins. A produção de metano por essas duas fontes é estimada em 5×10^{13} g/ano. **Todavia, a maior fonte de metano é o gás natural e o petróleo.** Neste os alcanos superiores também estão presentes e são obtidos principalmente por craqueamento.

Petróleo



O petróleo representa uma mistura complexa de compostos orgânicos (**tabela 1**), sendo, na sua maior parte, formada por alcanos e cicloalcanos.

Para converter este óleo em frações úteis, os componentes são separados através de um processo de destilação fracionada.

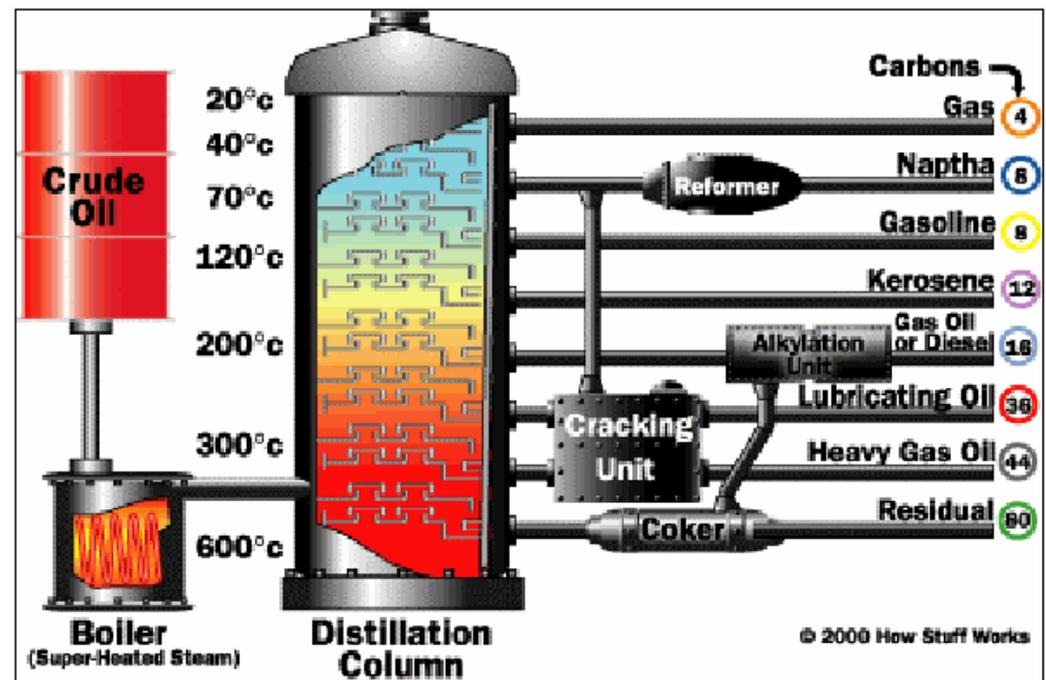
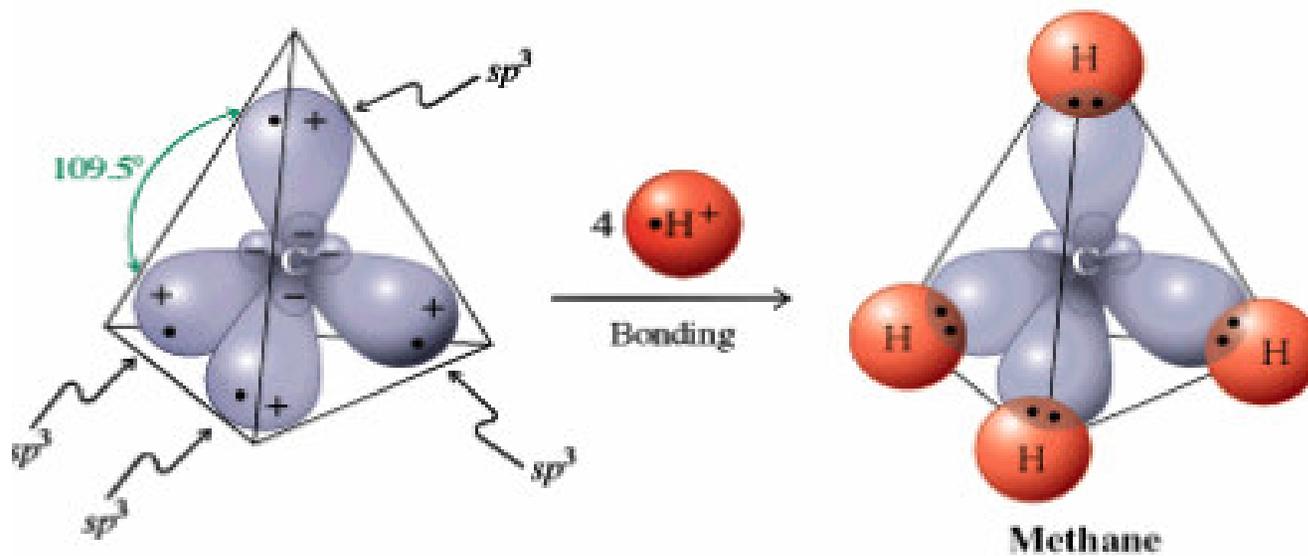
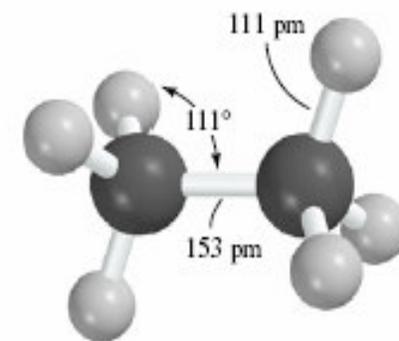
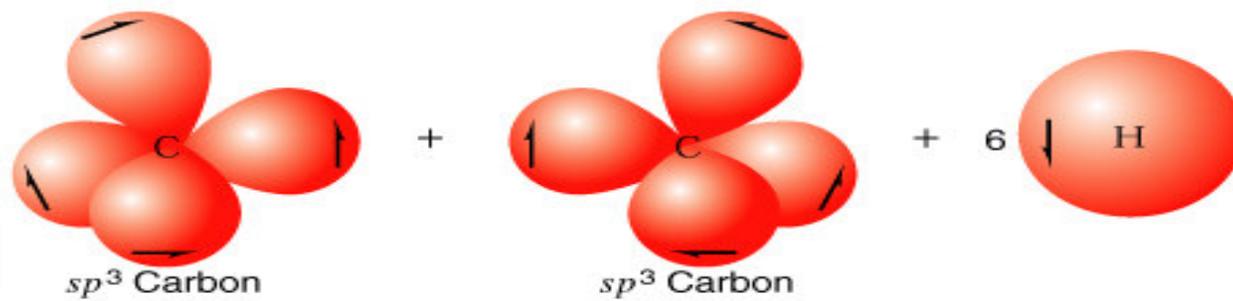


Tabela 1: Frações constituintes do petróleo.

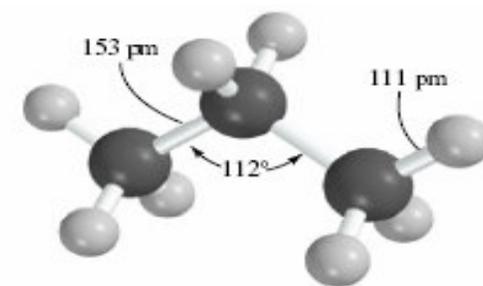
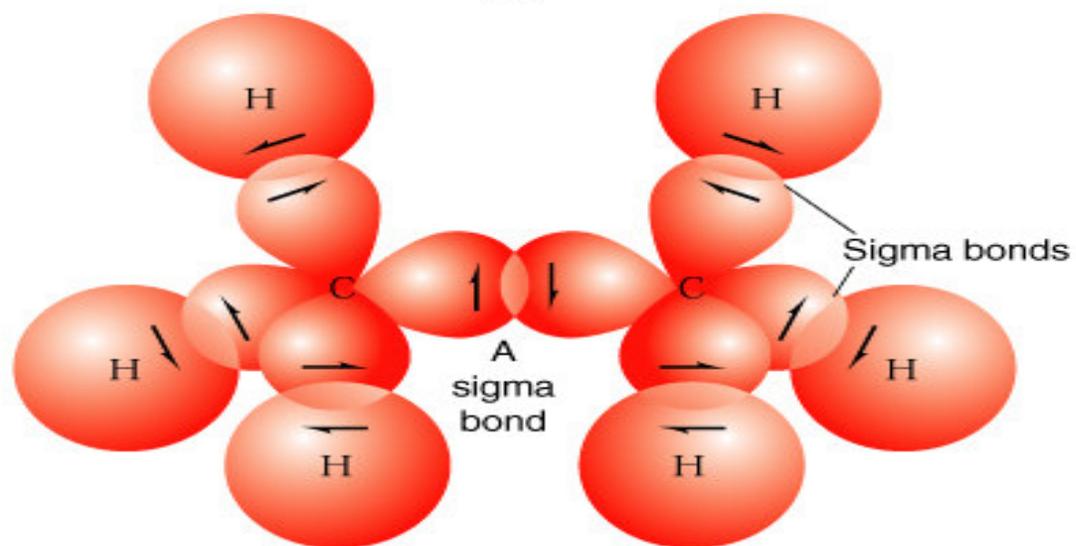
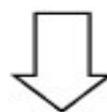
Fração	P.e. (°C)	Nº de átomos de carbono
Gás	< 20	1-4
Eter de petróleo	20-100	5-7
Gasolina natural	40-205	5-10 e <u>cicloalcanos</u>
Querosene	175-325	12-18 e aromáticos
Oleo combustível	275-400	12-25
Oleo lubrificante	400-500	25-35
Asfalto	sólidos	Compostos <u>policíclicos</u>

3- Ligações e geometria dos alcanos





Ethane



Propane

4- Nomenclatura dos alcanos

- O sistema formal de nomenclatura adotado hoje em dia é o proposto pela União de Química Pura e Aplicada (*IUPAC*). Foi desenvolvido inicialmente em 1892 e revisto em intervalos irregulares a fim de manter-se atualizado.
- Os nomes dos quatro primeiros alcanos não ramificados são: metano, etano, propano e butano. Os nomes dos outros alcanos, com maior número de carbonos, são formados de um prefixo numérico grego ou latino, seguido da terminação **ano** (**Tabela 2**).

Tabela 2: Nomes de alcanos normais.

Nº de C	Nome	Nº de C	Nome
1	Metano	17	Heptadecano
2	Etano	18	Octadecano
3	Propano	19	Nonadecano
4	Butano	20	Icosano
5	Pentano	21	Henicosano
6	Hexano	22	Docosano
7	Heptano	23	tricosano
8	Octano	30	triacontano
9*	Nonano	31	hentriacontano
10	Decano	40	tetracontano
11	Undecano	41	hentacontano
12	Dodecano	50	pentacontano
13	Tridecano	60	hexacontano
14	Tetradecano	70	heptacontano
15	Pentadecano	80	octacontano
16	Hexadecano	100	hectano

(*) Prefixo latino

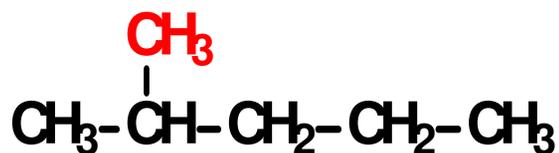
4.2- Nomenclatura dos grupos alquila não ramificados:

- Quando é retirado um hidrogênio de um alcano este terá uma valência livre, formando um substituinte alquila (ou grupo alquila). Esses grupos têm nomenclatura diferenciada, onde ocorre a substituição da terminologia **ano** por **il** ou **ila**. A letra “R” é usada para indicar qualquer grupo alquila.



4.3- Nomenclatura dos alcanos com cadeia ramificada:

O nome do grupo precede o da cadeia principal. Sempre deve ser identificado a cadeia principal, a qual recebe uma numeração de tal forma que o grupo substituinte permaneça com a menor numeração possível.



1 2 3 4 5

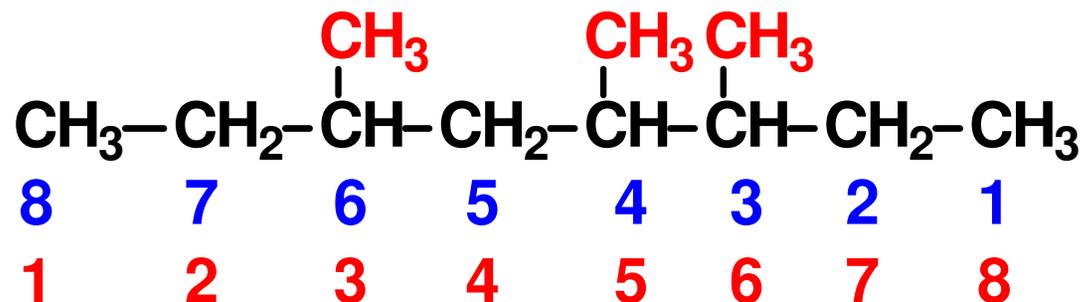
5 4 3 2 1

2-metilpentano (correto)

4-metilpentano (incorreto)

Quando uma série de grupo substituinte estiver presente na cadeia principal, o sentido da numeração a ser escolhido será o que fornecer a menor seqüência de números, independente da natureza dos grupos.

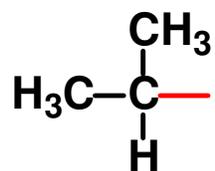
Quando existir grupos diferentes, eles serão citados em ordem alfabética. Quando existir grupos repetidos, estes são indicados pela adição do prefixo multiplicador correspondente (di, tri, tetra, penta,..).



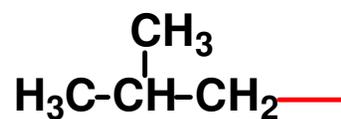
3,4,6 - Trimetiloctano (correto)

3,5,6 - Trimetiloctano (incorreto)

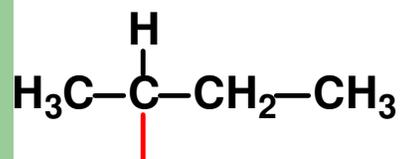
4.4- Nomenclatura dos grupos alquila ramificados:



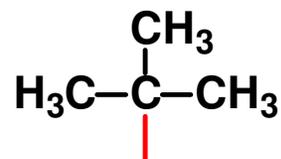
Isopropil(a)



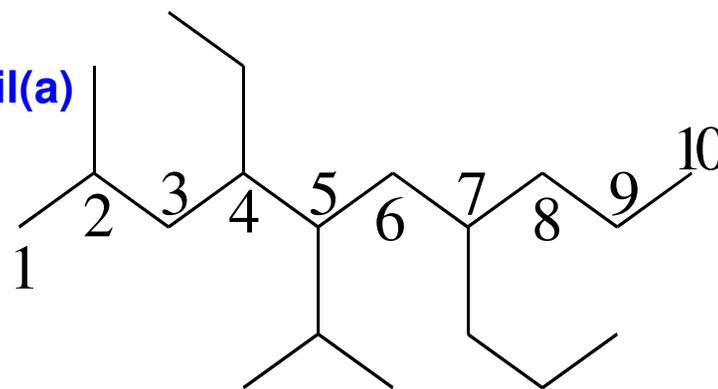
Isobutil(a)



sec-butil(a)

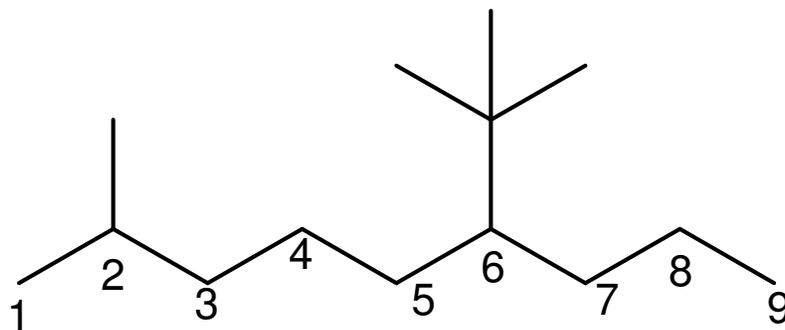


tert-butil(a)



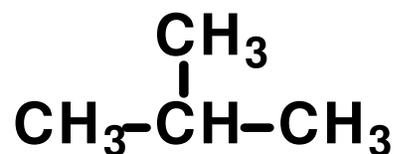
4-Etil-5-isopropil-2-metil-7-propildecano

Os prefixos *sec* e *ter* (*s* e *t*) são termos numéricos, portanto não fazem parte do nome do grupo e para fins de citação, a letra considerada para a citação em ordem alfabética é a do nome do grupo substituinte.

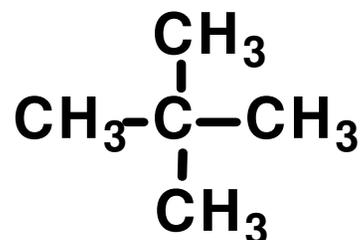


6-*t*-butil-2-metilnonano

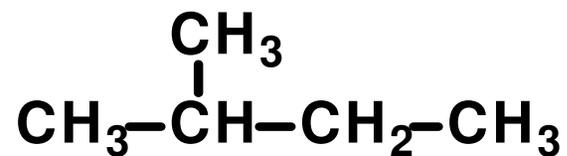
Alguns alcanos apresentam nomes não sistemáticos.



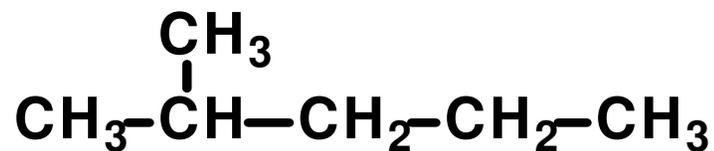
Isobutano



Neopentano



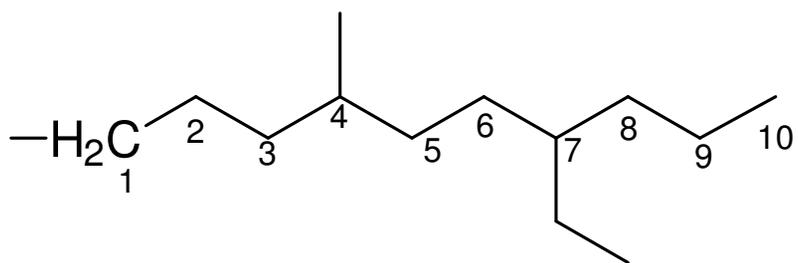
Isopentano



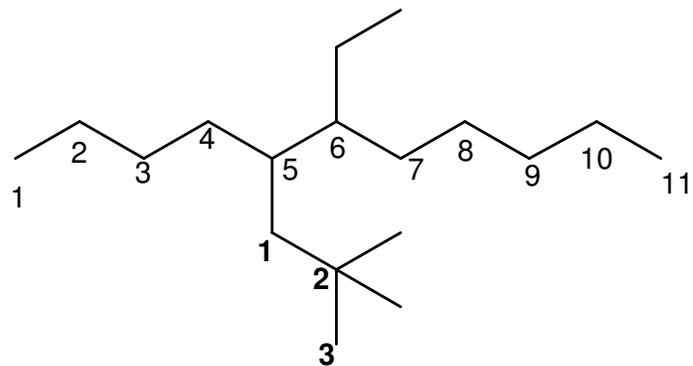
Isoexano

4.5- Grupos ramificados univalentes

Para fins de ordenação, o nome inicia com a primeira letra do nome completo das ramificações.



7-etil-4-metildecil (a)



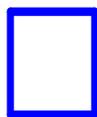
5-(2,2-dimetilpropil)-6-etilundecano

4.6- Nomenclatura dos cicloalcanos:

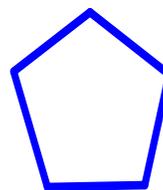
A nomenclatura dos cicloalcanos segue as mesmas regras dos alcanos, porém acrescido do prefixo ciclo.



Ciclopropano



Ciclobutano

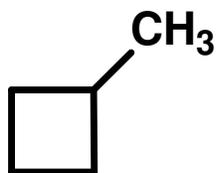


Ciclopentano

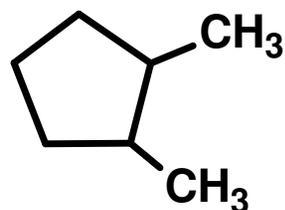


Cicloexano

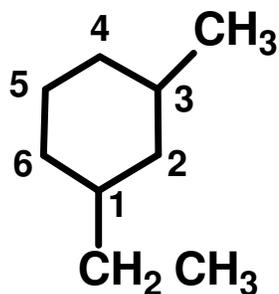
Para os cicloalcanos ramificados também são seguidas as regras dos menores números para os substituintes.



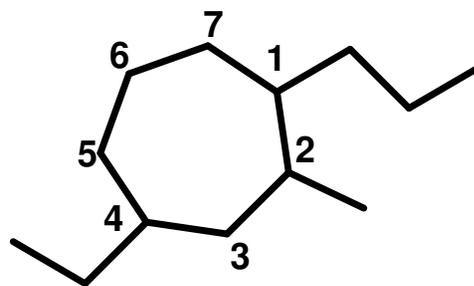
Metilciclobutano



1,2-Dimetilciclopentano

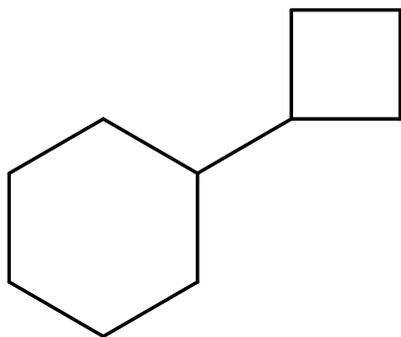


1-Etil-3-metilcicloexano

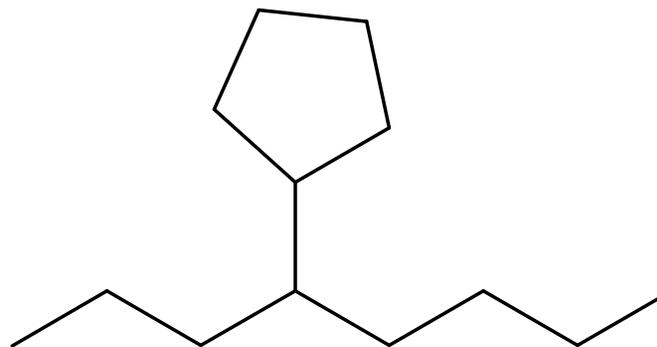


4-Etil-2-metil-1-propilcicloheptano

Os grupos substituintes cíclicos são nomeados de forma análoga aos grupos acíclicos.



Ciclobutilcicloexano



4-Ciclopentiloctano

CLASSIFICAÇÃO DOS ÁTOMOS DE CARBONO

- É prática comum em química orgânica os carbonos serem classificados da seguinte maneira:

Primário – ligado a apenas um outro átomo de carbono.

Secundário – ligado a dois outros átomos de carbono.

Terciário – ligado a três outros átomos de carbono.

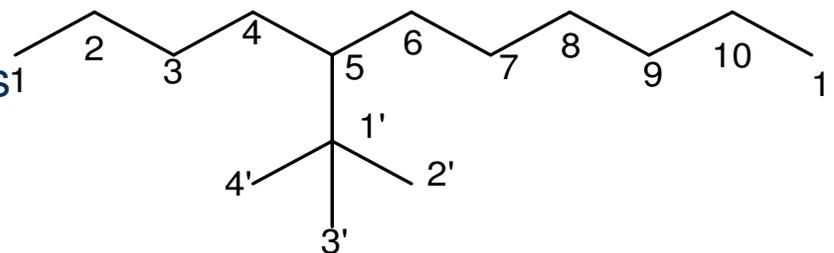
Quaternário – ligado a quatro outros átomos de carbono.

1, 11, 2', 3', 4' – carbonos primários

2, 3, 4, 6, 7, 8, 9, 10 – carbonos secundários

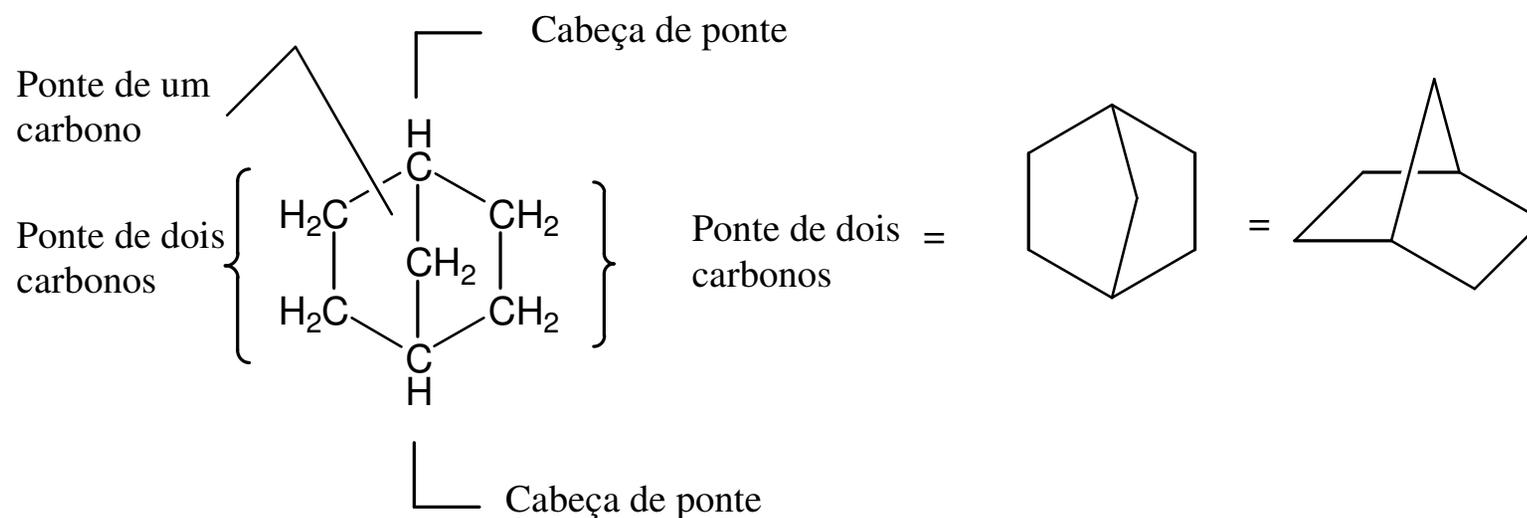
5 – carbono terciário

1' – carbono quaternário



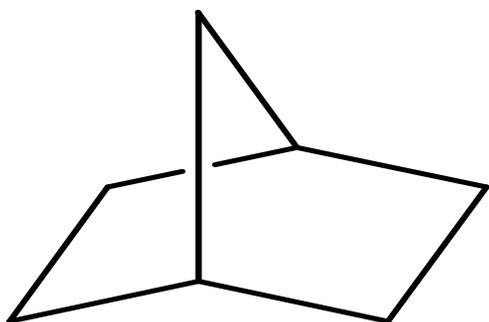
5- COMPOSTOS BICÍCLICOS:

Denominamos bicicloalcanos os compostos que contêm dois anéis fundidos ou formando ponte.

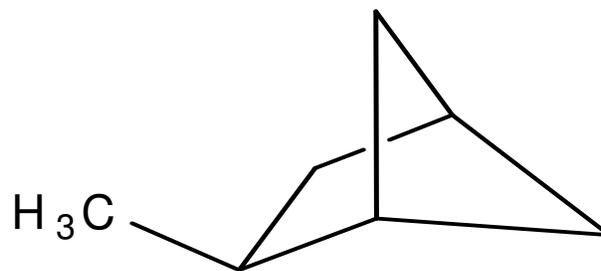


Um bicicloeptano

Adotamos como nome principal o do alcano correspondente ao número total de átomos de carbono nos anéis.



Biciclo[2.2.1]heptano (também chamado *norborano*)

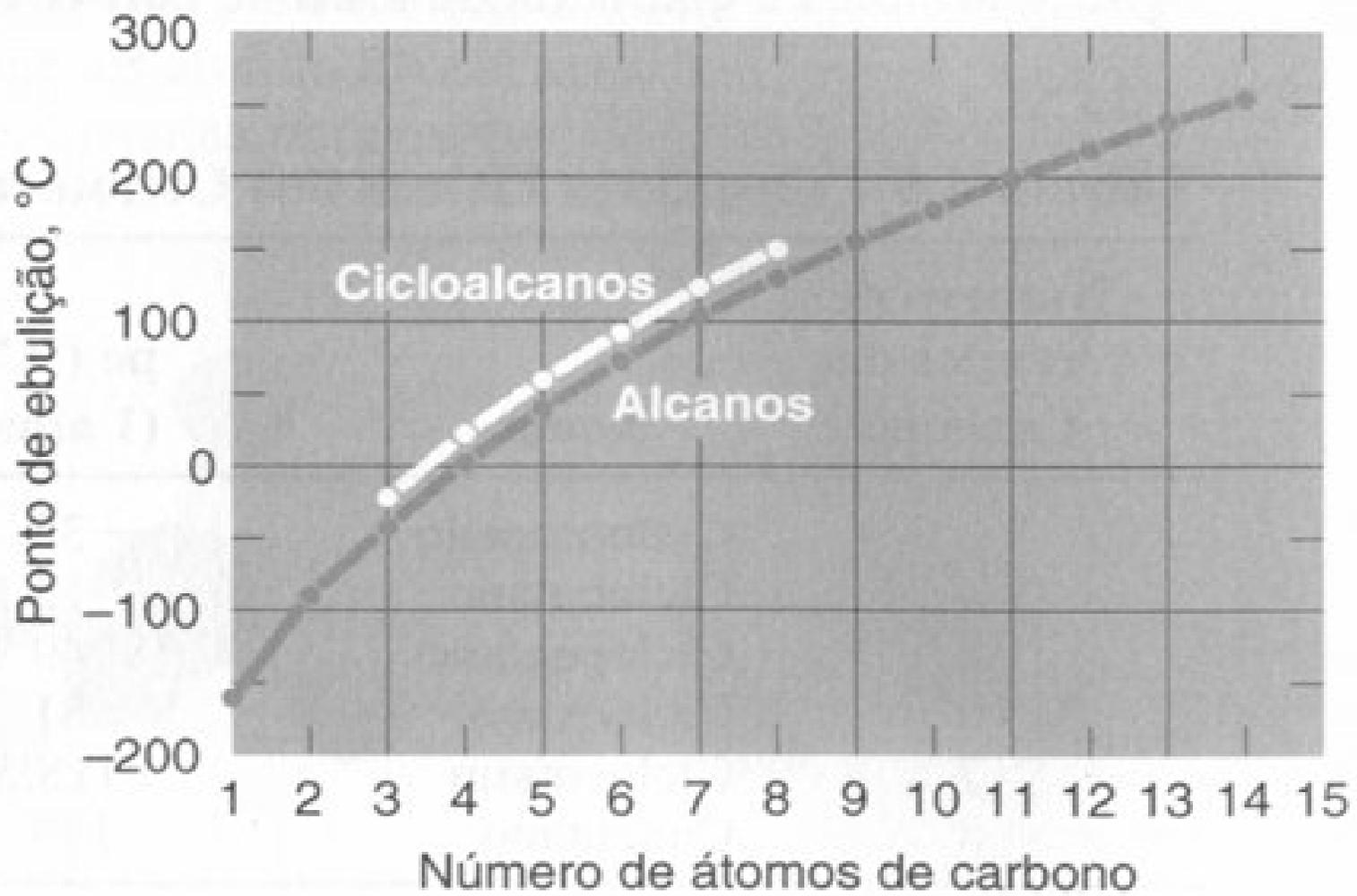


2-Metilbiciclo[2.1.1]hexano

6-Propriedades físicas de alguns alcanos

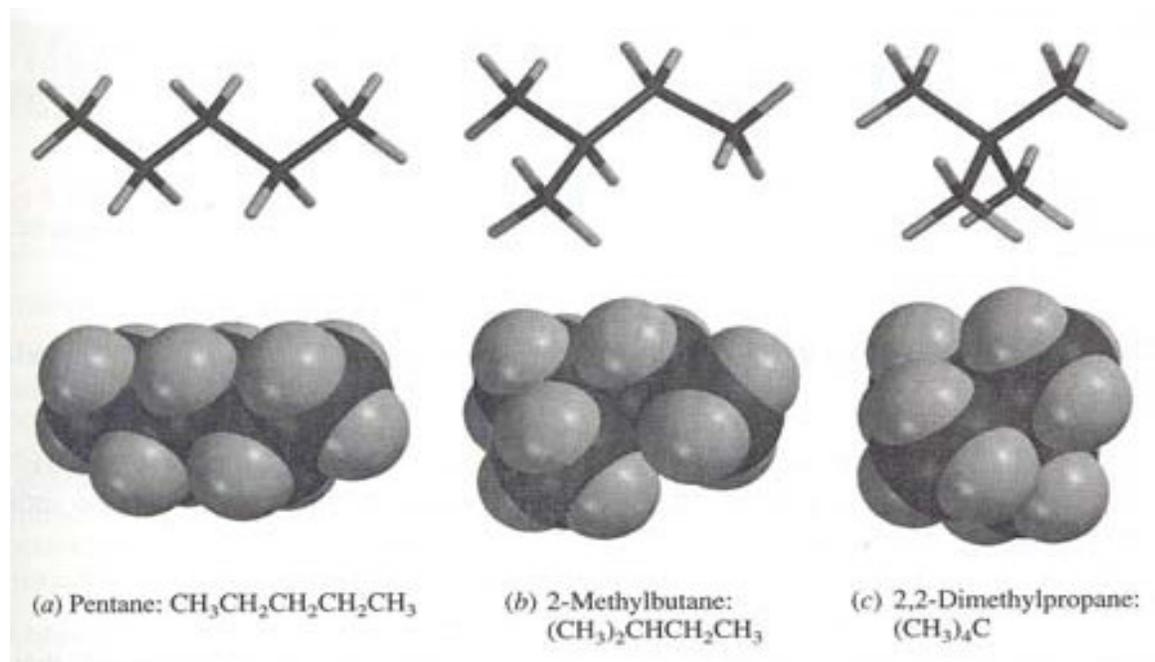
- Os alcanos são moléculas de baixa polaridade, e as forças de atração que atuam entre suas moléculas são do tipo dispersão de London. A magnitude desta força é proporcional a área de contato entre as moléculas, conseqüentemente, em alcanos lineares, excetuando os primeiros da série, ocorre um aumento na temperatura de ebulição de 20-30 °C para cada metileno adicionado.
- Alcanos não ramificados (25 °C, 1 atm) :
 - C1-C4: gases
 - C5-C17: líquidos
 - C18 ou mais: sólidos
- Em alcanos com o mesmo número de carbonos, a medida que o número de ramificações aumenta, diminui a temperatura de ebulição.

MOLECULAR FORMULA	STRUCTURAL FORMULA	mp (°C)	bp (°C) ^a (1 atm)	DENSITY ^b (g/mL)
C ₄ H ₁₀	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₃	-138.3	-0.5	0.6012 ²⁰
C ₄ H ₁₀	$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CHCH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	-159	-12	0.603 ²⁰
C ₅ H ₁₂	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	-129.72	36	0.6262 ²⁰
C ₅ H ₁₂	$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CHCH}_2\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	-160	27.9	0.6197 ²⁰
C ₅ H ₁₂	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	-20	9.45	0.61350 ²⁰
C ₆ H ₁₄	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	-95	68	0.65937 ²⁰
C ₆ H ₁₄	$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	-153.67	60.3	0.6532 ²⁰
C ₆ H ₁₄	$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHCHCH}_2\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	-118	63.265	0.6643 ²⁰
C ₆ H ₁₄	$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CH}-\text{CHCH}_3 \\ \quad \\ \text{CH}_3 \quad \text{CH}_3 \end{array}$	-128.8	58	0.6616 ²⁰
C ₆ H ₁₄	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	-98	49.7	0.6492 ²⁰

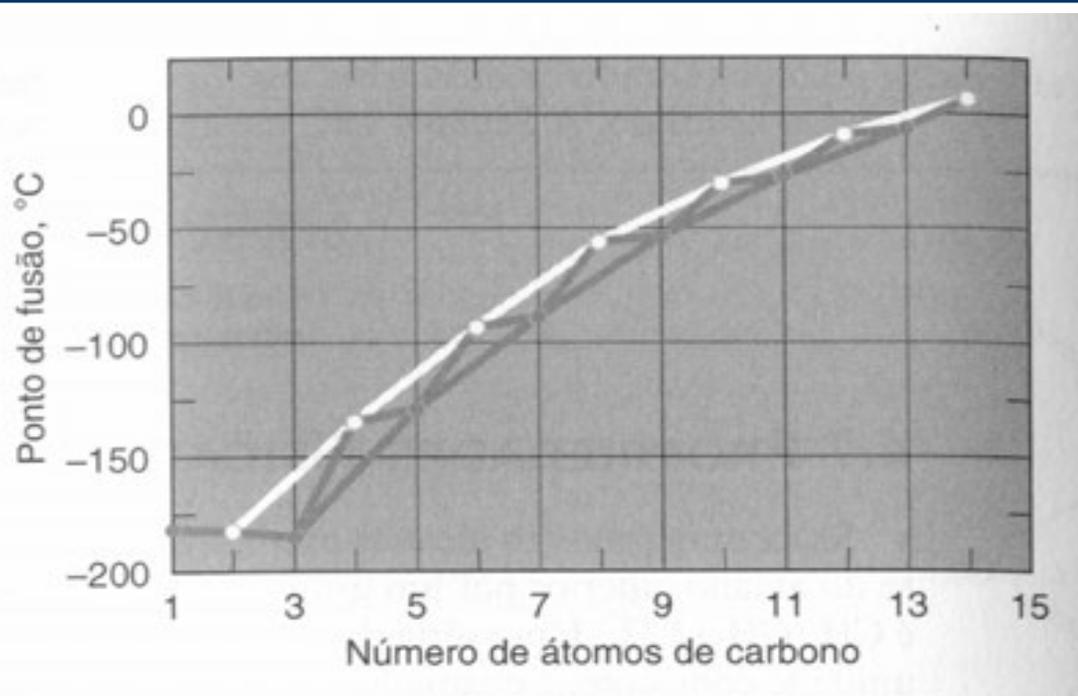


Ramificação Reduz o Ponto de Ebulição:

Diminui área de superfície, reduzindo forças de Van der Waals.

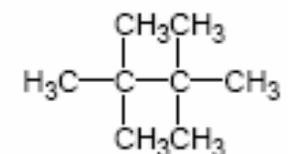


Ponto de Fusão (estado sólido para líquido)



Estruturas simétricas resultam em pontos de fusão relativamente elevados.

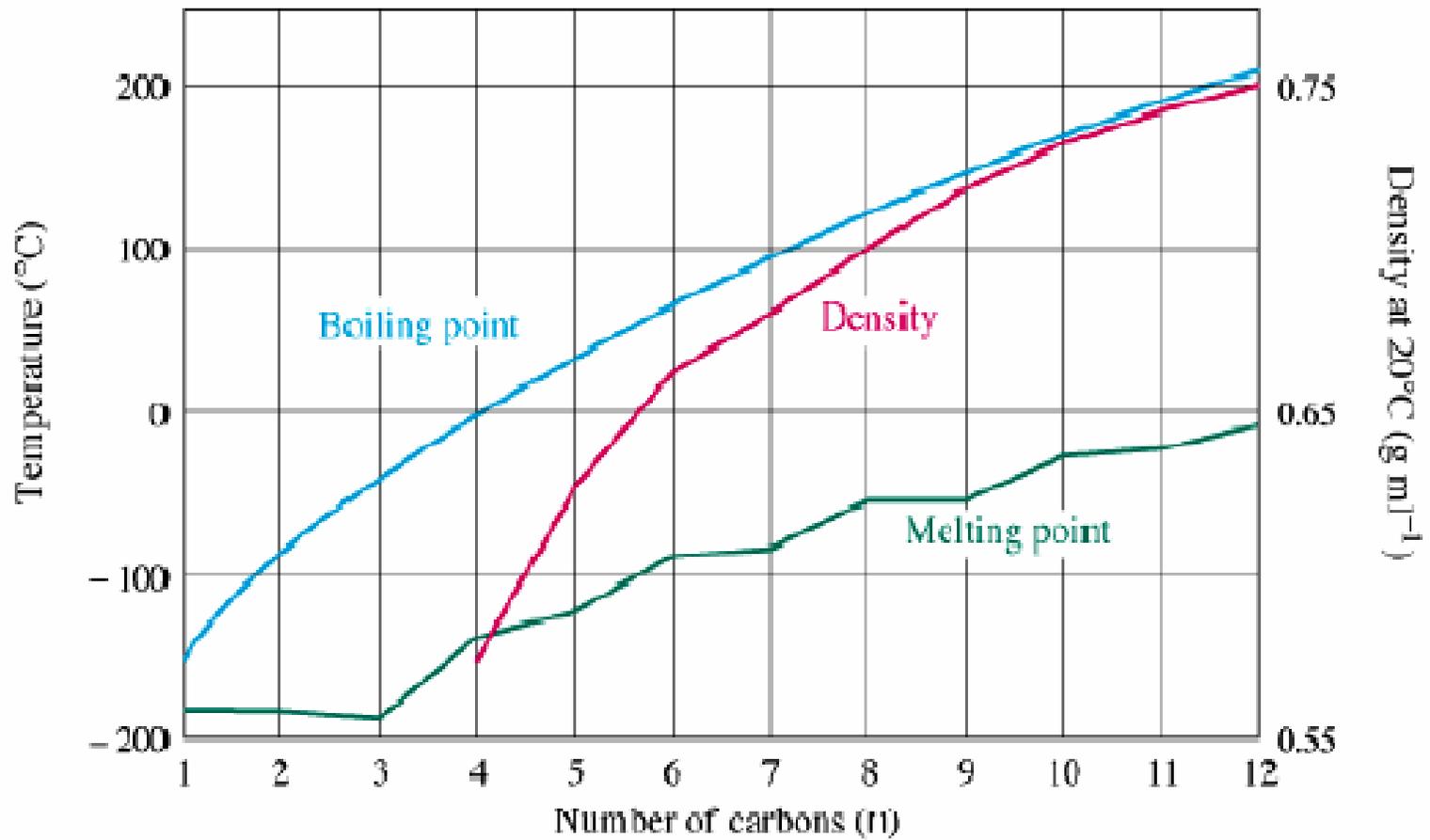
Exemplo:



2,2,3,3-Tetrametilbutano
pf: 100,7 °C

- A densidade dos alcanos aumenta paralelamente ao aumento do número de carbono, chegando ao máximo de $0,965 \text{ g/ cm}^{-3}$.
- A solubilidade dessa classe de compostos é bastante limitada em função da baixa solubilidade. Os alcanos são insolúveis em água e solúveis em solventes de baixa polaridade como o éter dietílico, clorofórmio, benzeno e tolueno.

Propriedades Físicas: Resumo



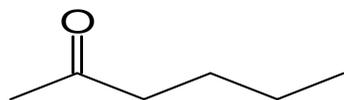
7- Propriedades fisiológicas

As propriedades fisiológicas exibidas pelos alcanos variam de acordo com a extensão da cadeia carbônica.

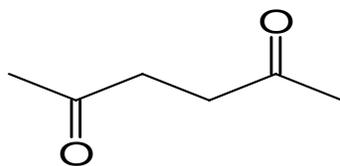
O metano é aparentemente inerte sob o ponto de vista fisiológico. Já outros alcanos gasosos ou o vapor de alcanos líquidos podem atuar como anestésicos e causar problemas cardíacos, como fibrilação ventricular. Em altas concentrações, o vapor desses compostos podem causar deficiência respiratória, pela depressão do sistema nervoso central.

Os alcanos quando manuseados com segurança, são pouco tóxicos se comparados às outras classes de compostos orgânicos. Entretanto, o hexano, componente comum da gasolina é utilizado também em laboratórios e indústrias, é extremamente tóxico.

A toxicidade do hexano se deve a oxidação no organismo humano, resultando na formação de cetonas como a 2-hexanona e 2,5-hexanodiona.



2-hexanona



2,5-hexanodiona

Além dos efeitos fisiológicos sistêmicos, os alcanos exibem ação fisiológica local. Alcanos líquidos, como os que constituem a gasolina e o querosene, quando em contato com a pele destroem a camada lipopreiteica produzida pela epiderme, podendo o contato prolongado resultar em dermatite. Entretanto, os alcanos de maior peso molecular, os sólidos, são amplamente utilizados pela indústria de cosméticos em virtude da ação emoliente. A vaselina é uma mistura semi-sólida de hidrocarbonetos, largamente utilizada na preparação de produtos protetores da pele.

8- Ligações sigma e rotação das ligações

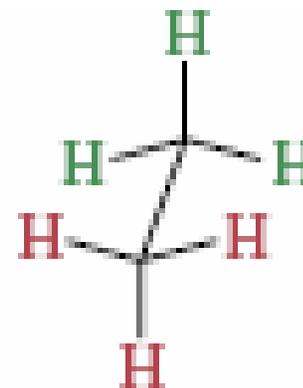
- Os grupos ligados por apenas uma ligação sigma (isto é, por uma ligação simples) podem girar em torno da ligação, uns em relação aos outros, devido à simetria cilíndrica da ligação σ . Os diferentes arranjos dos átomos que provêm da rotação interna em uma ligação simples são denominados **conformações**, e uma conformação específica é denominada um **confômero** (isômero conformacional). Ao contrário dos isômeros constitucionais, os isômeros conformacionais diferentes não são normalmente isolados porque se interconvertem rapidamente.

2-Maneiras de representar os isômeros conformacionais

Os químicos representam os isômeros conformacionais de duas maneiras:

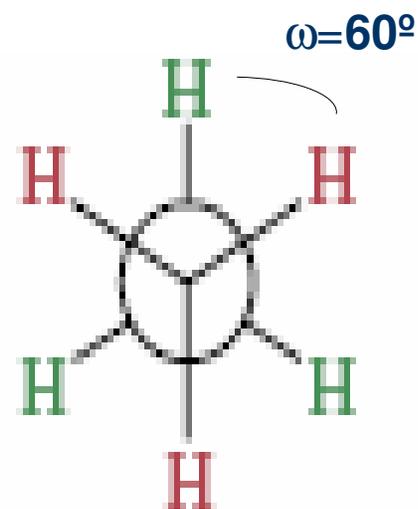
A) Projeção em cavalete

As representações em cavalete são fórmulas em perspectiva que apresentam a ligação carbono-carbono segundo uma linha de fuga e indicam a orientação espacial pela exibição de todas as ligações C-H.



B) Projeção de Newman

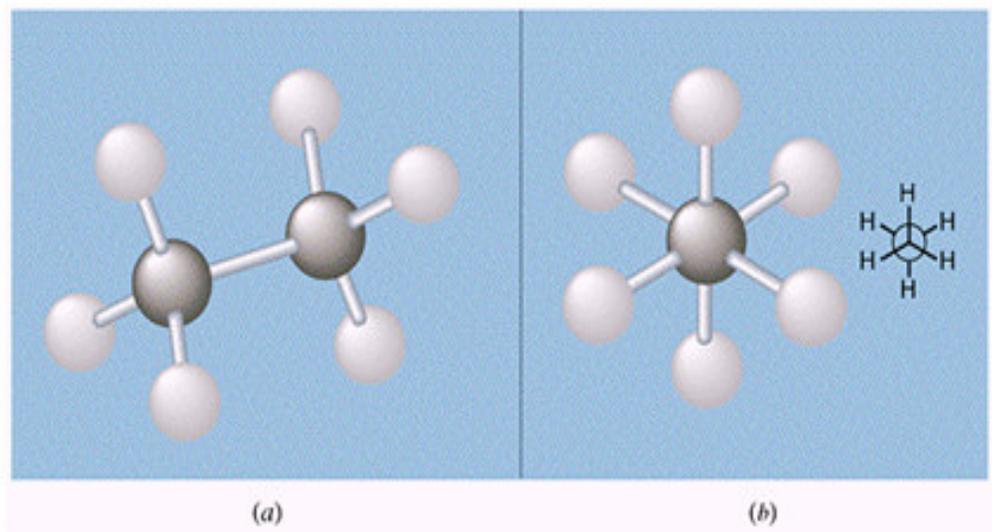
Nas projeções de Newman, a ligação carbono-carbono é colocada diretamente na linha de visão do observador e os dois átomos de carbono são representados como círculos coincidentes. As ligações do carbono frontal são representadas por linhas que chegam ao centro do círculo. As ligações do carbono posterior se interrompem na circunferência do círculo.



3- Molécula do etano:

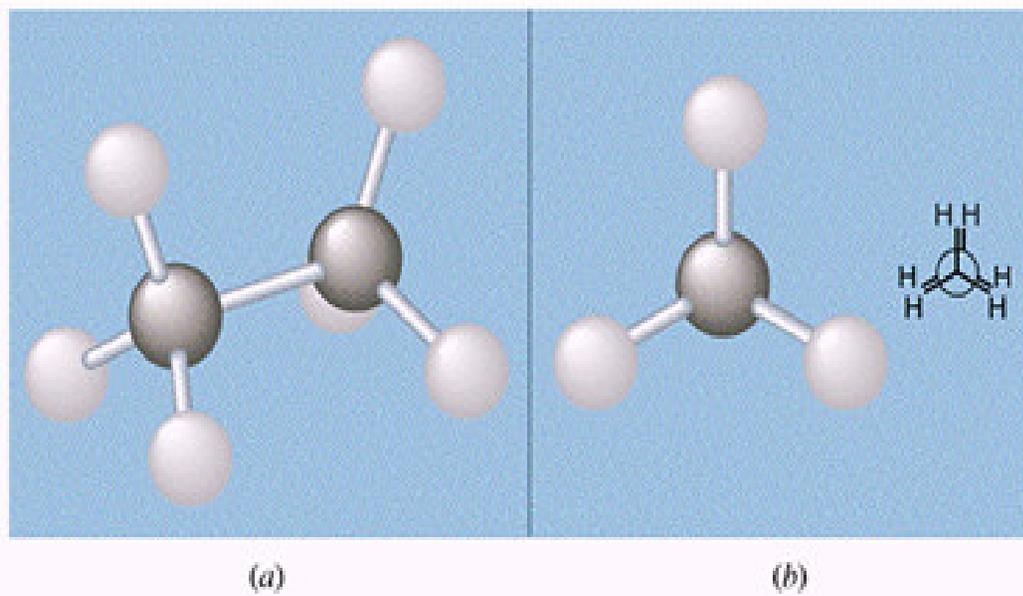
No etano podemos imaginar dois extremos no arranjo de um grupamento metila com respeito ao outro durante a rotação em torno da ligação C-C:

1) Conformação alternada



- a) A conformation alternada do etano.
- b) A fórmula de Newman para a conformation alternada

B) Conformação eclipsada

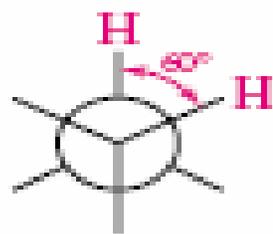


a) A conformação eclipsada do etano.

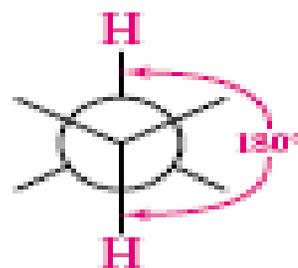
(b) A fórmula de Newman para a conformação eclipsada

Estabilidade dos isômeros conformacionais do etano

- A conformação alternada é a mais estável (isto é, é a conformação com a energia potencial mais baixa). Este efeito explica-se com facilidade em termos das interações repulsivas dos pares de elétrons de ligação. A conformação alternada permite a separação máxima possível entre os pares de elétrons das seis ligações carbono-hidrogênio e, assim, é a que tem a energia mais baixa.



Torsion angle - 60°
Gauche



Torsion angle - 180°
Anti

A conformação eclipsada é a menos estável . Quando se olha ao longo do eixo da ligação carbono-carbono, os átomos de hidrogênio ligados a cada átomo de carbono, na conformação eclipsada,

estão em oposição direta, um ao outro. Esta conformação envolve a interação repulsiva máxima entre os elétrons das seis ligações carbono-hidrogênio. É então a conformação de energia mais elevada e tem menor estabilidade.



Torsion angle = 0°
Eclipsed

4- Análise Conformacional

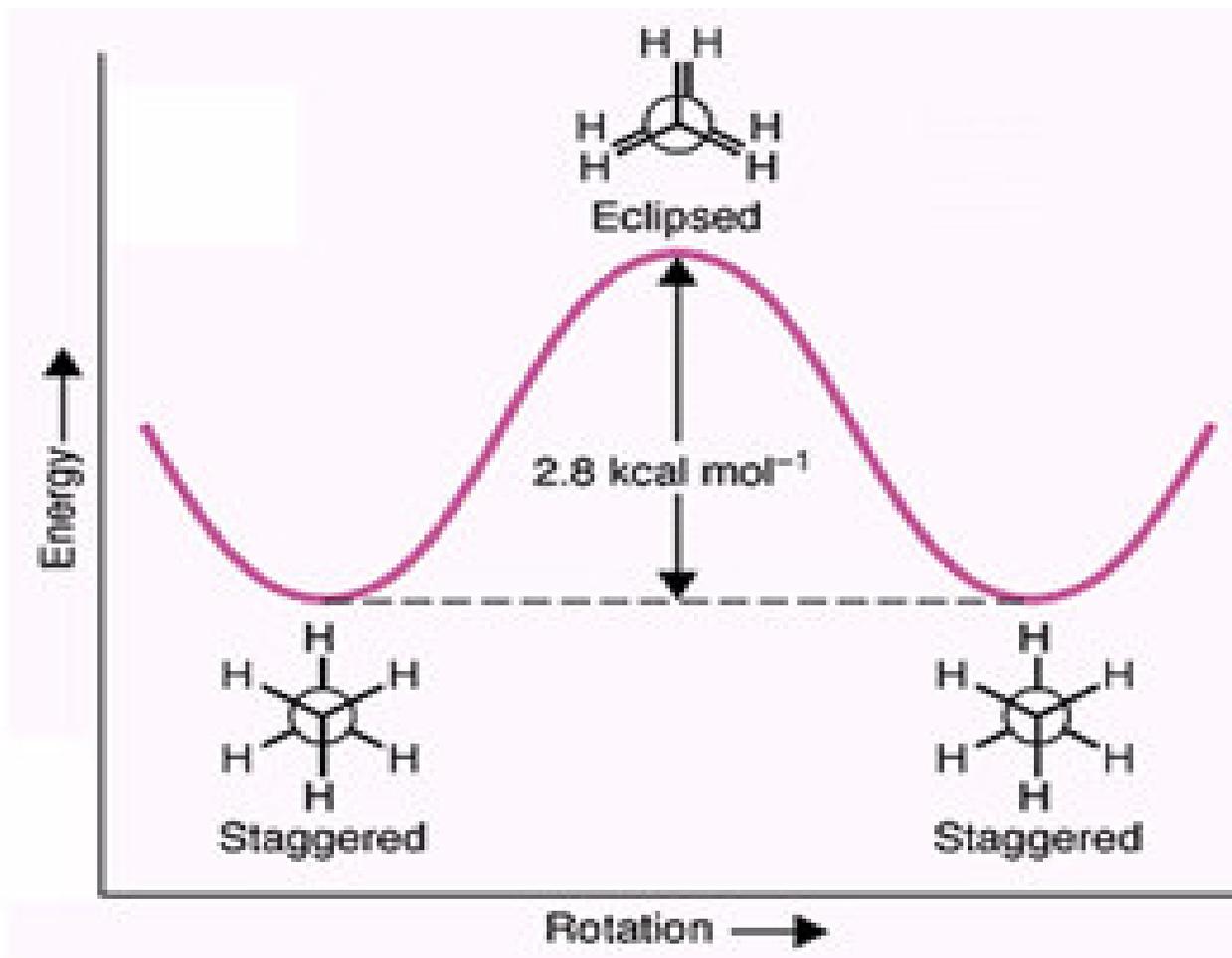
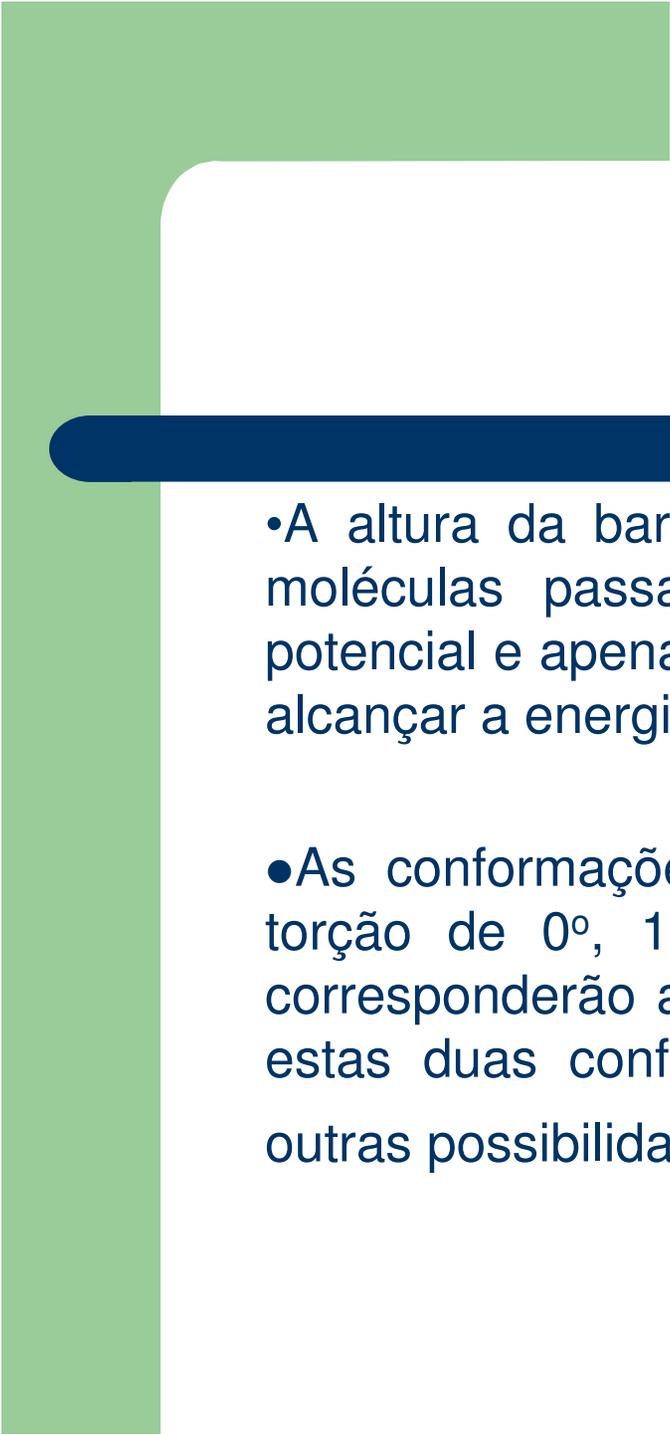


Gráfico de energia potencial *versus* rotação de ligação no etano

- A altura da barreira rotacional no etano, calculada a partir de dados de capacidade calorífica, é de 2,8kcal/mol.
- Esta barreira oposta à rotação livre, se deve à tensão de torção da conformação eclipsada da molécula (acredita-se que a tensão de torção é consequência da repulsão entre as nuvens de elétrons nas ligações carbono-hidrogênio, mais intensa no isômero em coincidência do que no isômero em oposição). Cada interação contribui com cerca de 0,93kcal/mol. Os cálculos indicam que a distância internuclear hidrogênio-hidrogênio no isômero em oposição é de 2,55 Å , e que esta distância diminui para 2,29 Å no isômero em coincidência.



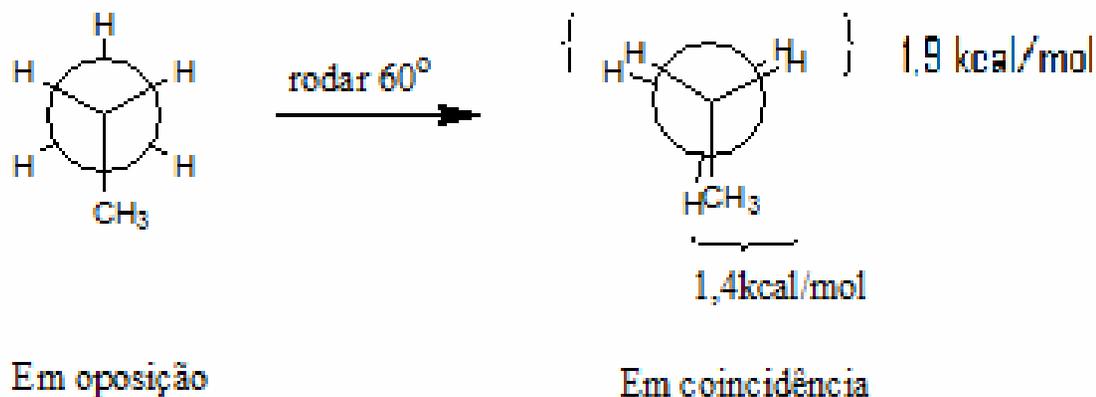
- A altura da barreira é tal que, à temperatura ambiente, as moléculas passam a maior parte do tempo no poço de potencial e apenas ocasionalmente têm energia suficiente para alcançar a energia mais alta.

- As conformações eclipsadas corresponderão a ângulos de torção de 0° , 120° , 240° ; e as conformações alternadas corresponderão a ângulos de torção de 60° , 180° , 300° . Entre estas duas conformações-limite há um um sem-número de outras possibilidades.

5- Alcanos superiores:

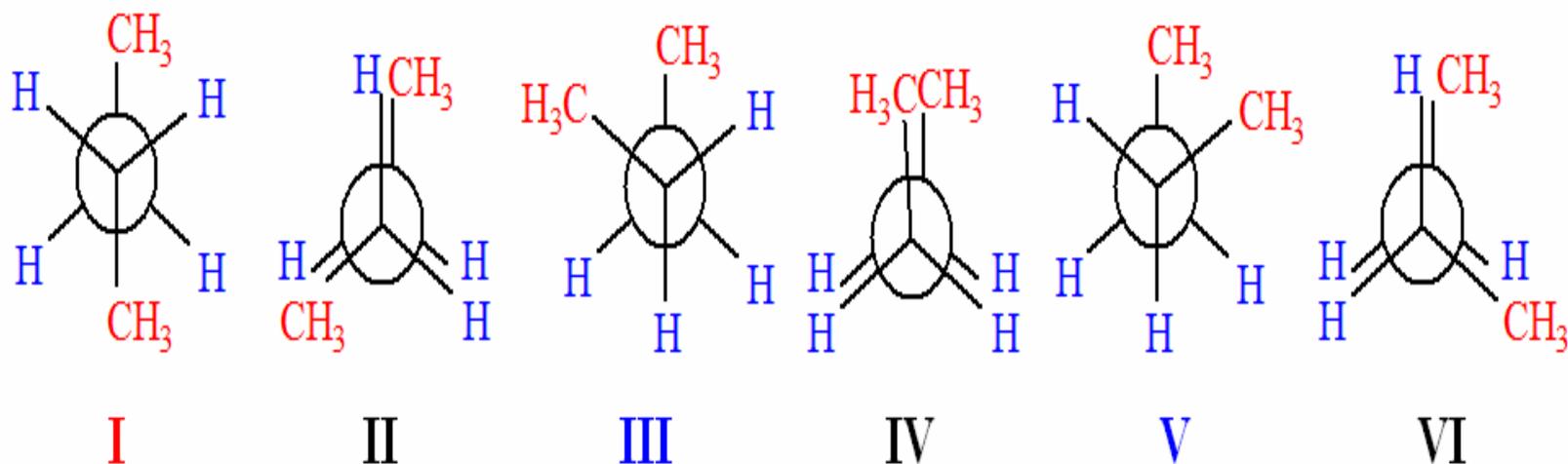
5.1- Propano

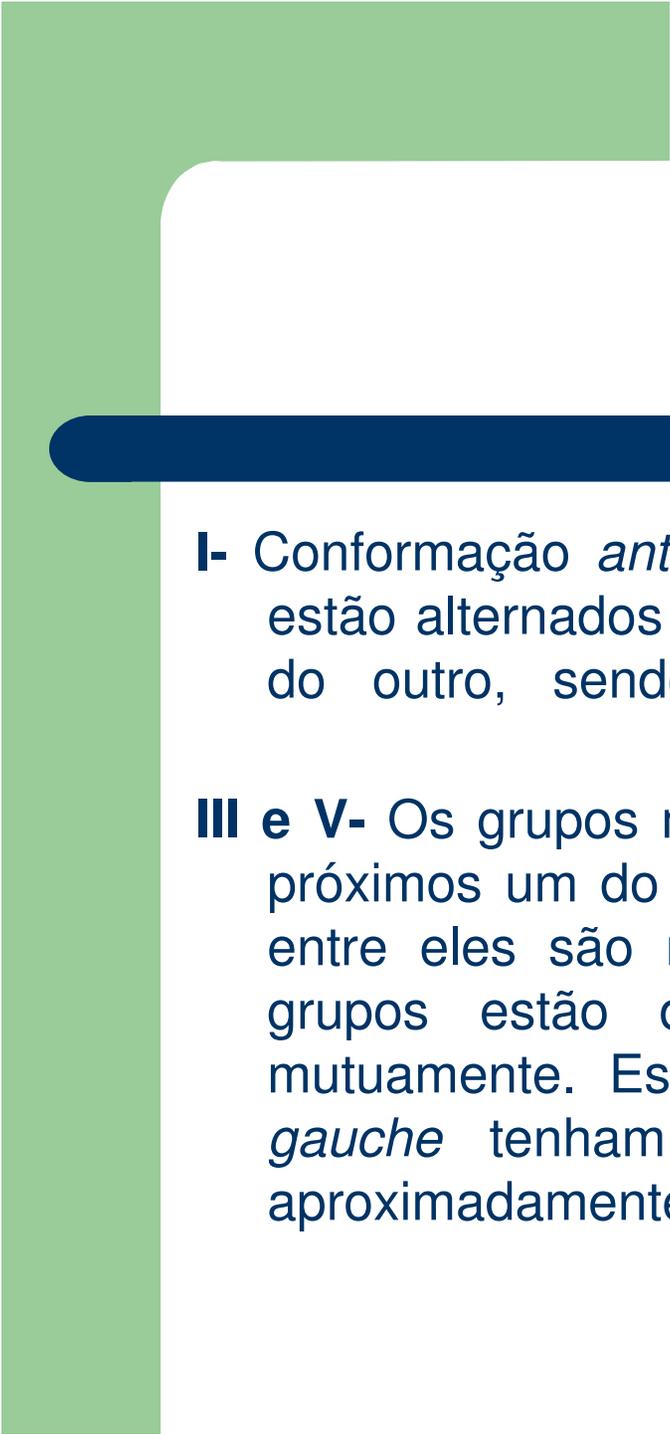
No propano encontramos também um pequena barreira de rotação em torno das ligações carbono-carbono. Esta barreira é ligeiramente maior do que no etano- 3,4 kcal/mol contra 2,8 kcal/mol. No isômero em coincidência do propano, existem duas interações hidrogênio-hidrogênio como as encontradas no etano, e uma terceira interação entre uma ligação carbono-hidrogênio e uma ligação carbono-carbono.



5.2- Butano:

- Se considerarmos a rotação em torno da ligação C2-C3 no butano, a tensão de torção também tem importância. Neste caso, porém, há fatores adicionais. Para ver quais são estes fatores, analisemos as conformações importantes no butano, de **I** até **VI**.



- 
- 
- I- Conformação *anti*: não tem tensão de torção, pois os grupos estão alternados e os grupos metila estão muito afastados um do outro, sendo portanto, a conformação mais estável.

 - III e V- Os grupos metila nas conformações *gauche* estão muito próximos um do outro e, então, as forças de van der Waals entre eles são repulsivas; as nuvens de elétrons dos dois grupos estão de tal forma próximas que se repelem mutuamente. Esta repulsão faz com que as conformações *gauche* tenham mais energia que a conformação *anti*, aproximadamente mais 0,9 kcal/mol.

- **II, IV e VI-** Estas conformações eclipsadas representam máximos de energia no diagrama de energia potencial (Fig.5). As conformações eclipsadas II e VI têm não só tensão de torção mas também repulsões de van der Waals adicionais, provocadas pelos grupos metila e hidrogênio eclipsados. A conformação eclipsada IV tem a maior energia entre todas, pois além da tensão de torção tem também uma grande força repulsiva de van der Waals entre os grupos metila eclipsados.
- Embora as barreiras à rotação numa molécula de butano sejam maiores do que as que existem na molécula do etano, são muito pequenas para que se possam isolar as conformações *gauche* e *anti* em temperaturas normais.

5.2.1- Análise conformacional do butano:

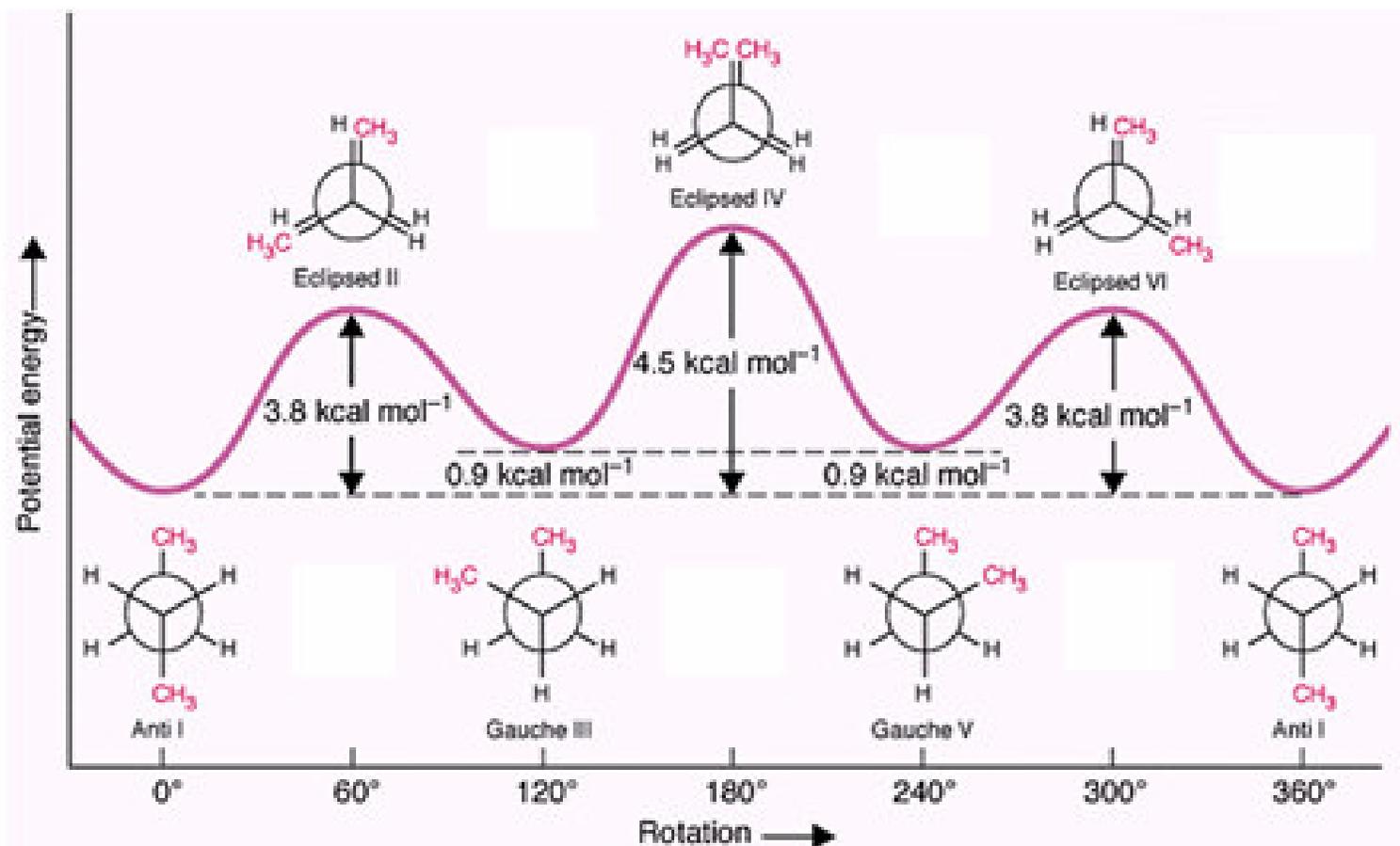


Fig. 5- Variações de energia provocadas pela rotação em torno da ligação C2-C3 do butano.

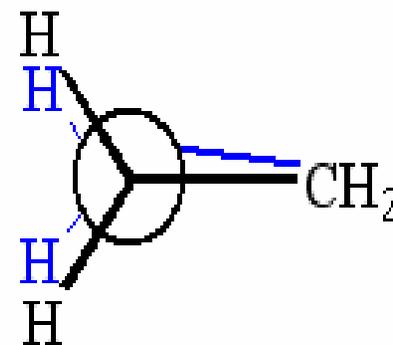
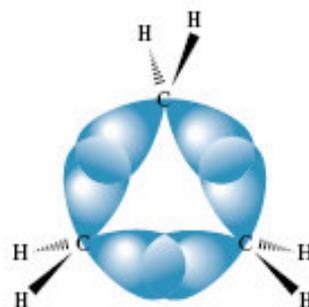
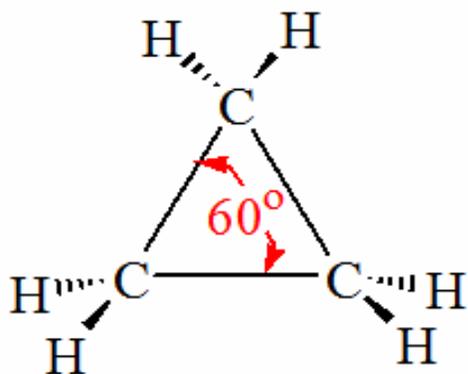
6- As estabilidades Relativas dos Cicloalcanos: Tensão de Anel

- **6.1- Estrutura**

A estabilidade dos cicloalcanos é dependente do número de carbonos existente no anel. A ciclização da cadeia pode levar a uma deformação angular (abertura ou fechamento do ângulo entre os orbitais), que é o fator determinante na estabilidade desses compostos.

Pela geometria do ciclopropano, identificamos que o ângulo das ligações C–C é de 60° .

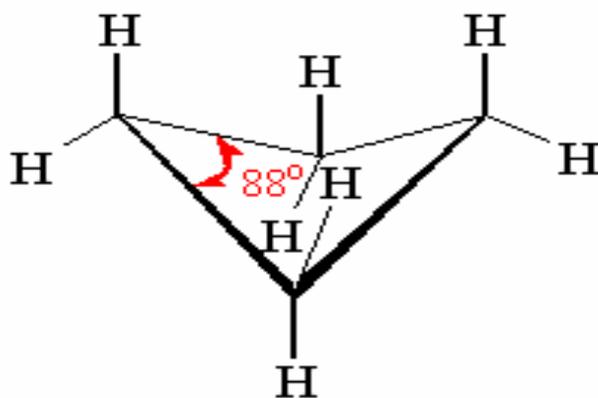
Este valor é muito distante do ângulo tetraédrico de uma ligação entre carbonos com hibridação sp^3 , e por isso o anel apresentará uma grande tensão angular, gerando instabilidade, além da tensão de torção.



Projeção de Newman

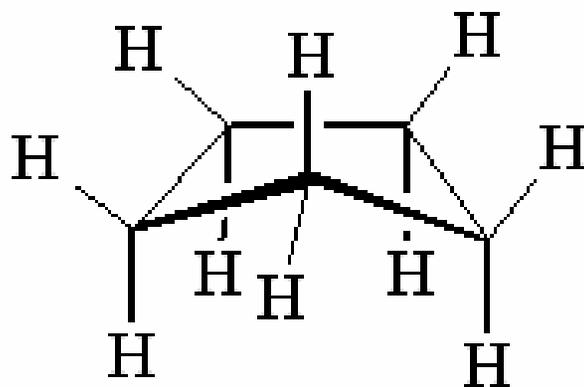
No ciclobutano, o ângulo das ligações é de 88° , ainda distante do ângulo tetraédrico.

Com esse ângulo identificamos que a geometria do ciclobutano não é planar, pois nesta última situação, o ângulo seria de 90° . Essa redução do ângulo resulta num aumento da estabilidade em relação a estrutura plana, pois permite uma redução da tensão torcional.

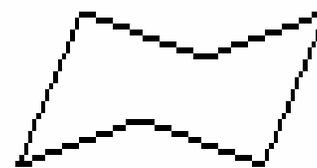
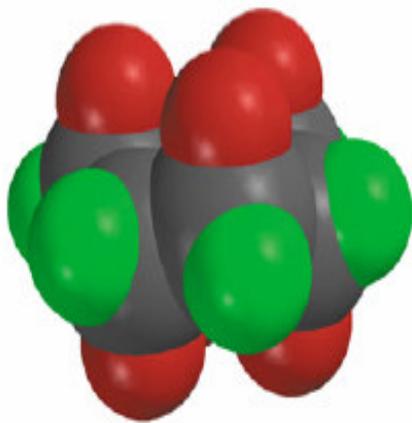
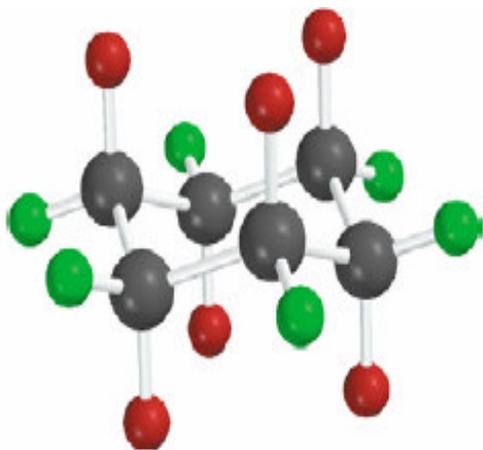


O ciclopentano assume uma conformação de envelope.

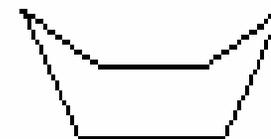
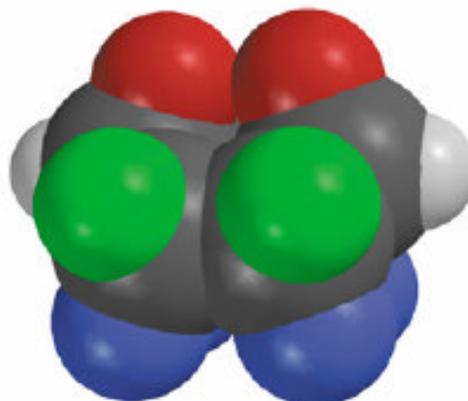
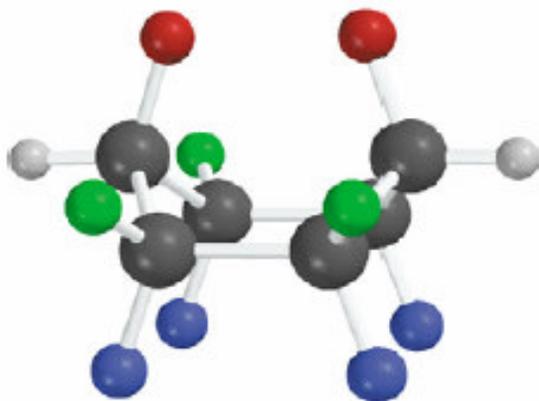
Os átomos se dispõem no espaço, afastando-se da forma plana, de modo que os ângulos das ligações C–C se aproximem ao máximo do ângulo tetraédrico.



O cicloexano adota duas conformações, denominadas de cadeira e barco.



Cadeira



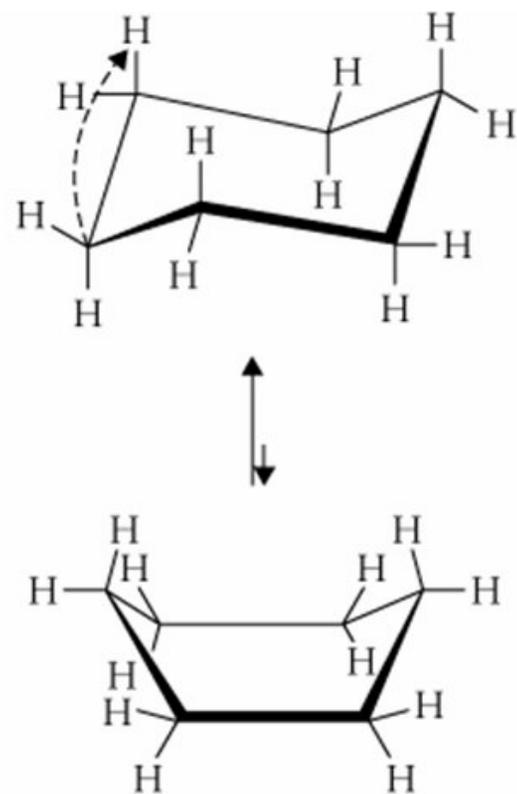
Barco

Os ângulos das ligações C–C são de $109,5^\circ$, e por isso temos maior estabilidade nesse composto, comparado aos demais cicloalcanos.

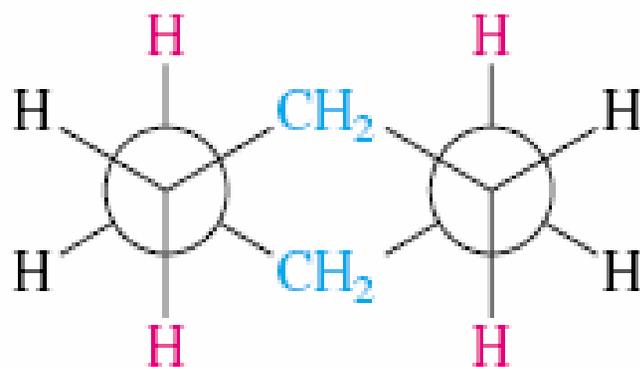
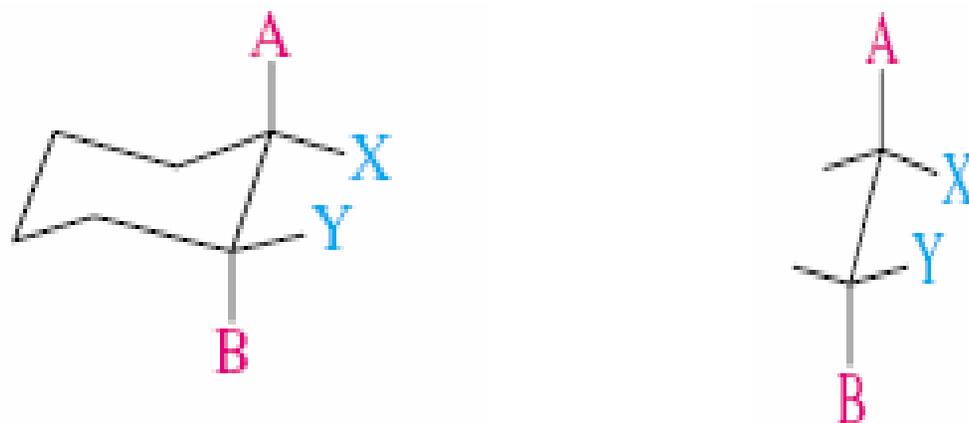
6.2- Análise das conformações do cicloexano:

Entre as duas conformações existe diferença de estabilidade, sendo a cadeira o confôrmero de maior estabilidade.

Devido a maior estabilidade da conformação em cadeira, mais de 99% das moléculas do cicloexano estão, num certo instante em cadeira. Existem outras conformações possíveis entre a conformação em cadeira e a bote.

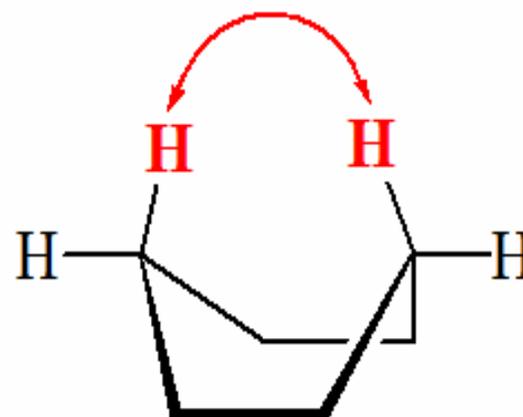
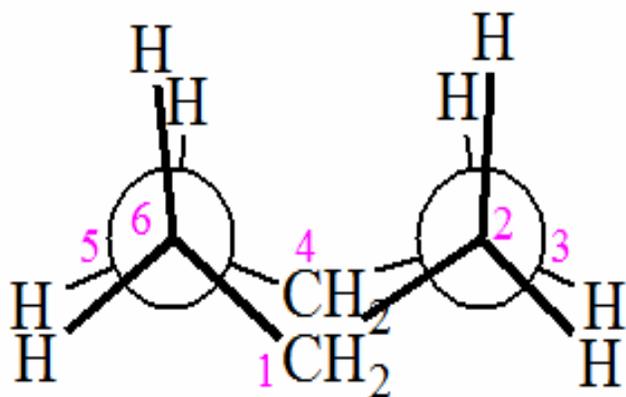


Na conformação em cadeira não há tensão angular e também não tem tensão de torção.

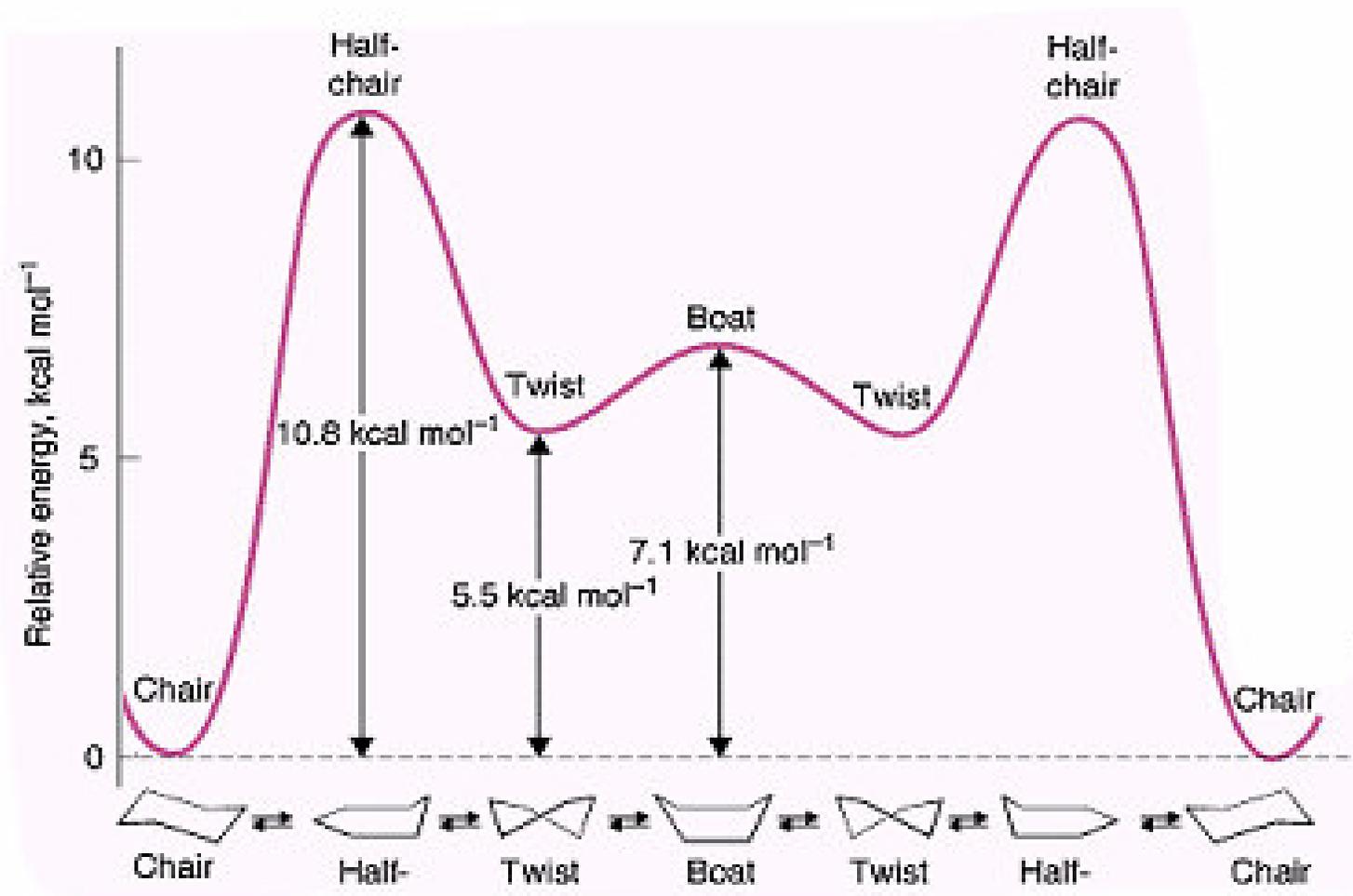


A conformação em bote não está, porém isenta de tensão de torção. Quando se olha o modelo da conformação em bote ao longo dos eixos das ligações carbono-carbono laterais, verifica-se que os hidrogênios destes átomos de carbono estão eclipsados.

Além disto, dois dos átomos do hidrogênio C1 e em C4, estão suficientemente próximos um do outro para provocar repulsões de van der Waals (interação de mastro). A tensão de torção e as interações de mastro fazem com que a conformação em bote tenha energia consideravelmente mais elevada que a conformação em cadeira.

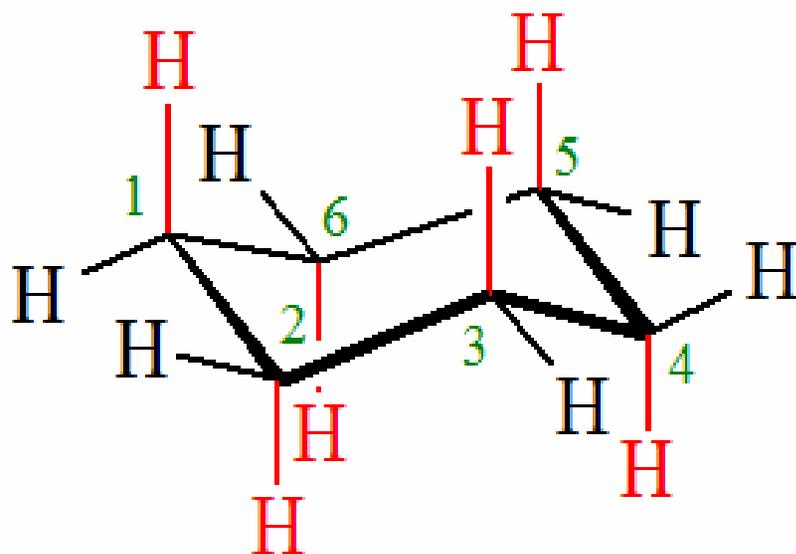


6.3- Análise conformacional do cicloexano:



7- Estereoisomeria

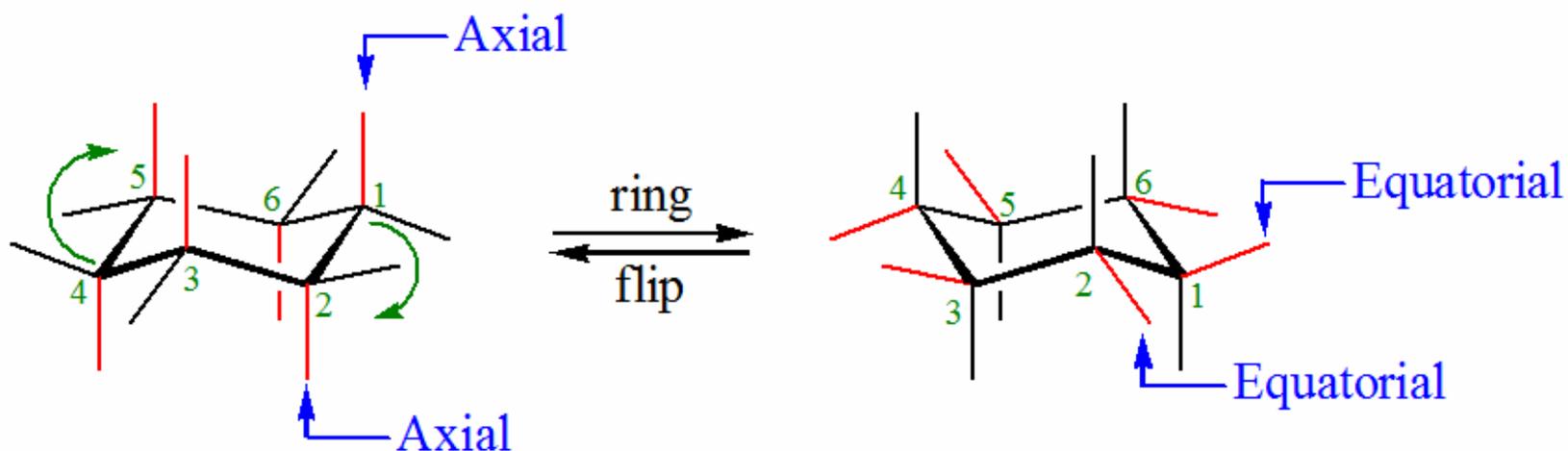
7.1- Cicloexanos Substituídos: Átomos de Hidrogênio Axiais e Equatoriais



Em vermelho= 6 átomos de hidrogênio em axial

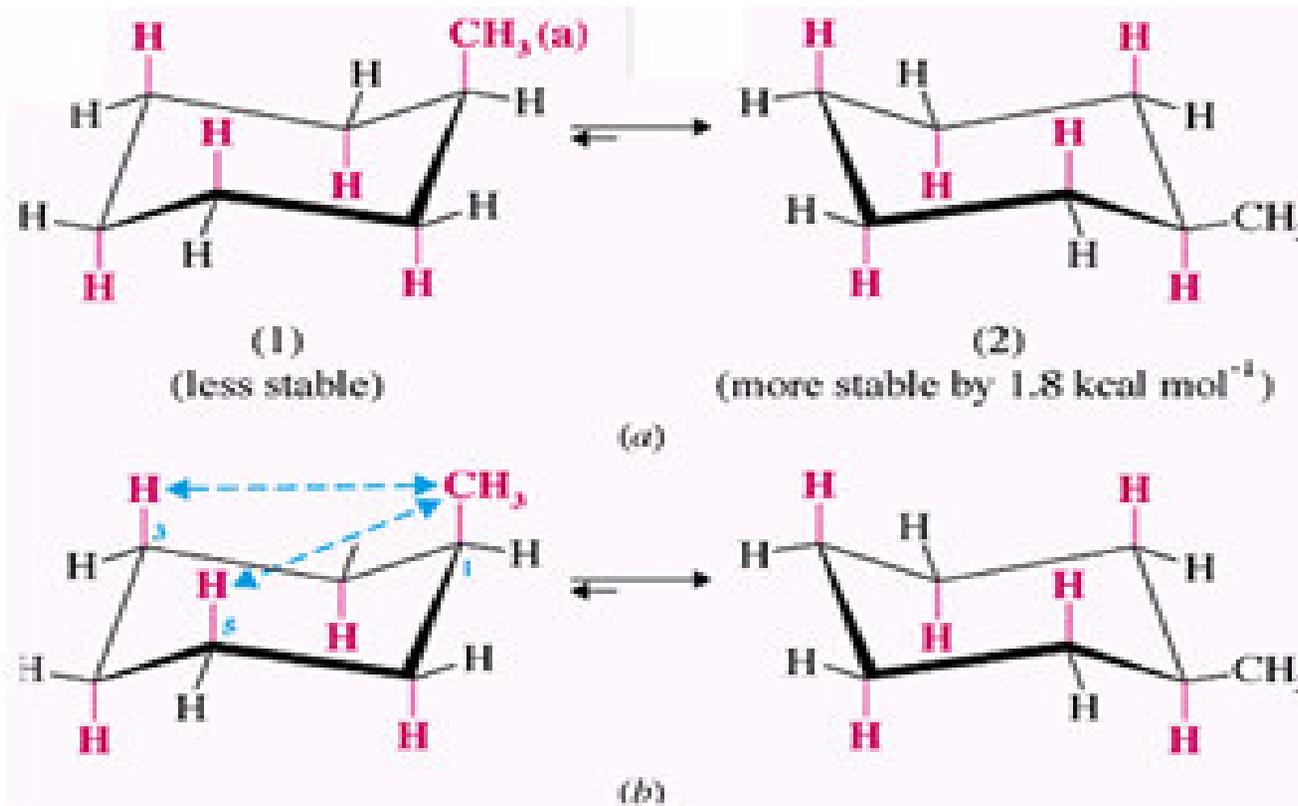
Em preto= 6 átomos de hidrogênio em equatorial

Na temperatura ambiente o anel do cicloexano oscila rapidamente entre duas conformações equivalentes da cadeira. É importante acentuar que, quando o anel oscila, todas as ligações que eram axiais se tornam equatoriais e vice-versa:



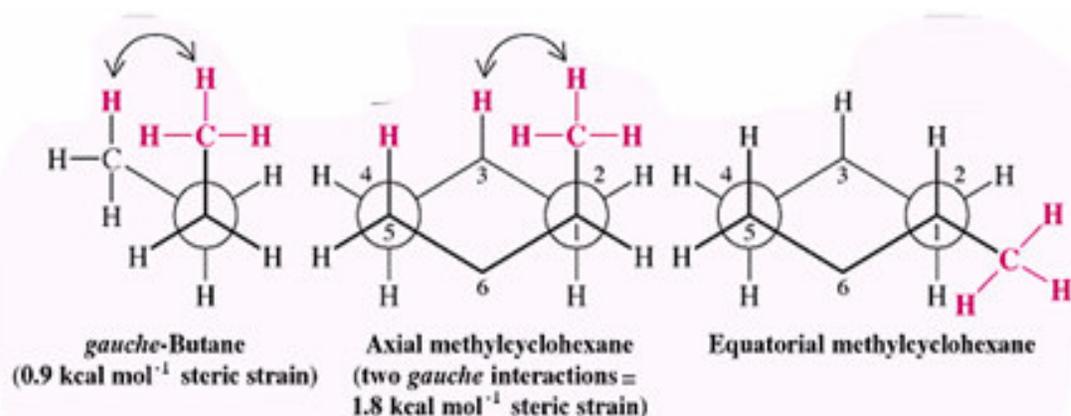
Quando um átomo de hidrogênio é substituído por um grupo alquila, podemos observar que: a conformação mais estável será aquela que deixar o grupo substituinte em posição equatorial.

- Metilcicloexano



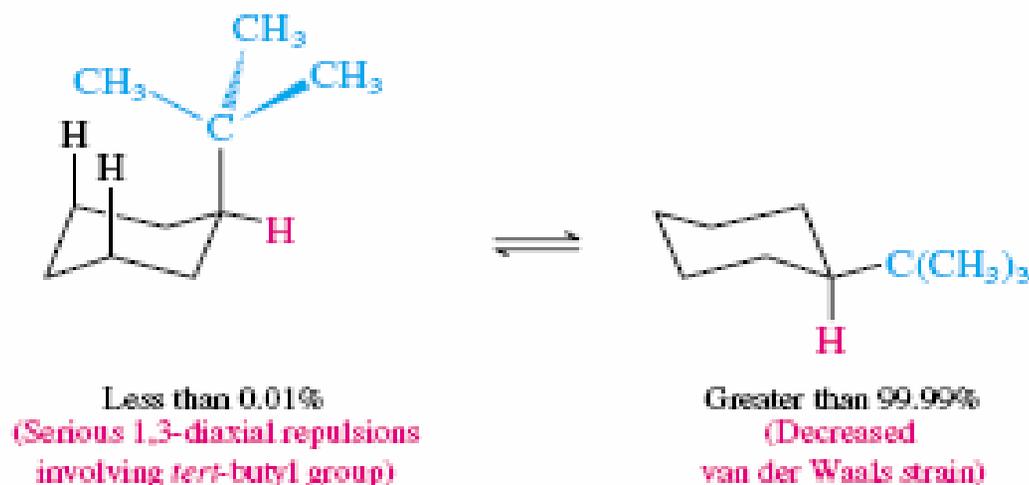
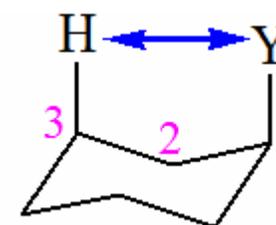
A diferença de energia entre os isômeros conformacionais axial e equatorial é decorrente da tensão estérica causada pelas chamadas interações 1,3-diaxiais.

- Isto é o grupo metila axial no C1 está muito próximo dos hidrogênios axiais dos carbonos em C3 e C5, resultando em 1,8kcal/mol de tensão estérica. O que é verdadeiro para o metilcicloexano também o é para outros cicloexanos monossustituídos: o confôrmero com o substituinte equatorial é quase sempre mais estável do que o confôrmero com o substituinte axial. A maior ou menor tensão estérica 1,3-diaxial de um composto específico depende, é claro, da natureza e do tamanho do grupamento axial (tab. 1)



Tab. 1- A Tensão estérica em cicloexanos monossustituídos

Grupo Y	Tensão de uma interação 1,3-diaxial (kcal/mol)
-F	0,12
-Br	0,25
-OH	0,5
-CH ₃	0,9
-CH ₂ CH ₃	1,1
-C(CH ₃) ₃	2,7
-COOH	0,7



t- Butilcicloexano

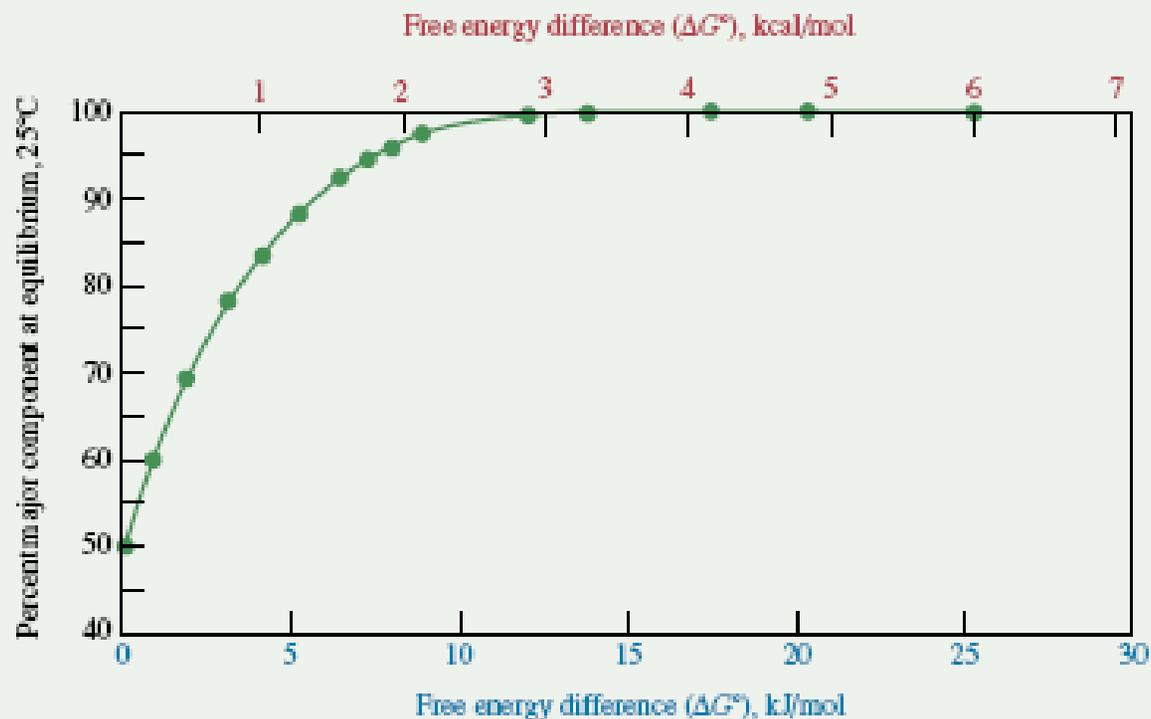
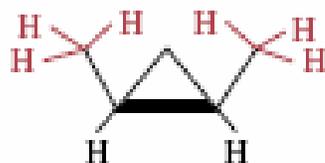


FIGURE 3.17 Distribution of two products at equilibrium plotted as a function of the difference in free energy (ΔG°) at 25°C between them.

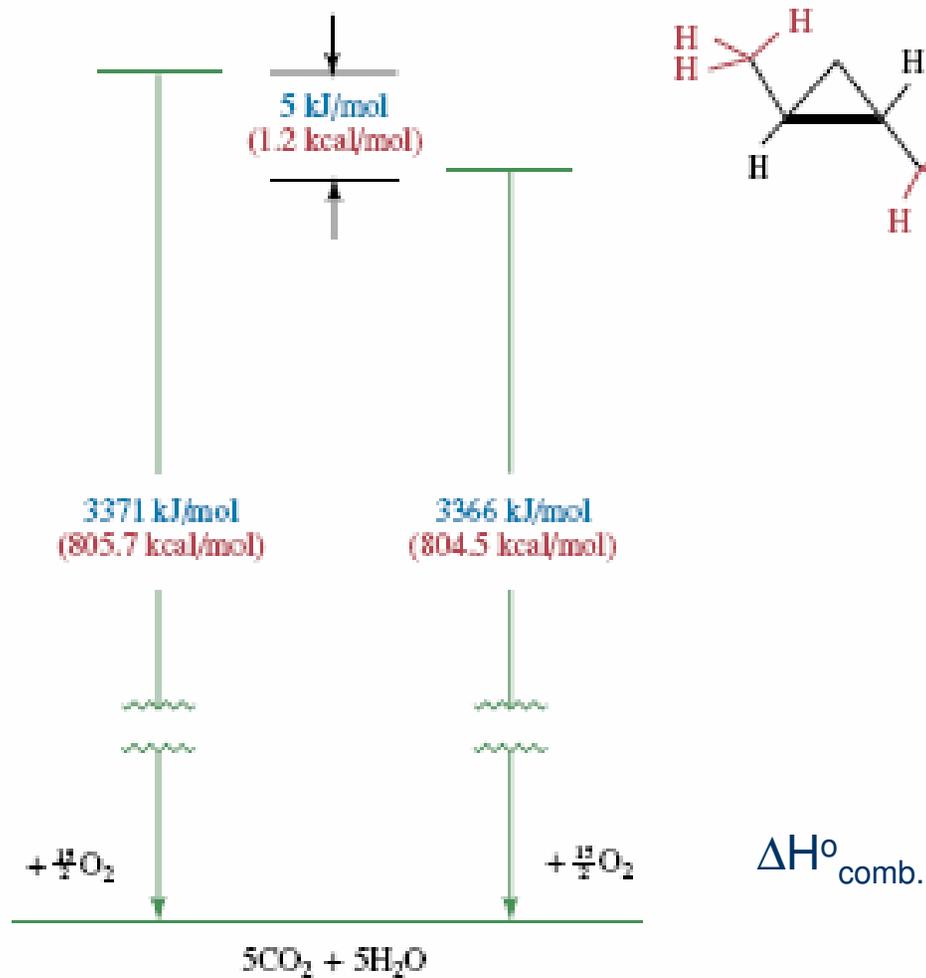
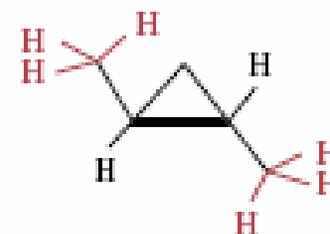
Substituent X	Percent axial	Percent equatorial	K	$\Delta G^\circ_{298\text{ K}}$	
				kJ/mol	(kcal/mol)
—F	40	60	1.5	–1.0	(–0.24)
—CH ₃	5	95	19	–7.3	(–1.7)
—CH(CH ₃) ₂	3	97	32.3	–8.6	(–2.1)
—C(CH ₃) ₃	<0.01	>99.99	>9999	–22.8	(–5.5)

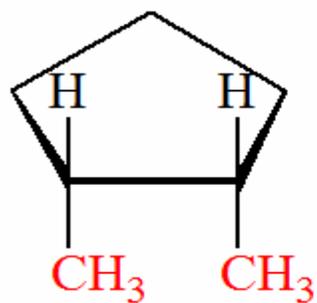
7.2- Cicloalcanos dissubstituídos: isomerismo *cis-trans*

cis-1,2-Dimethylcyclopropane

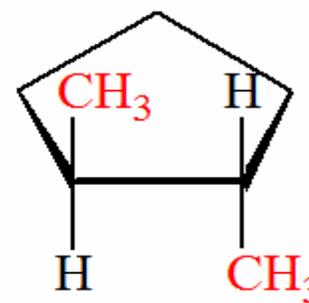


trans-1,2-Dimethylcyclopropane

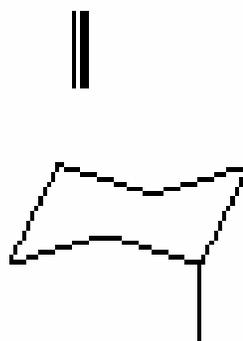
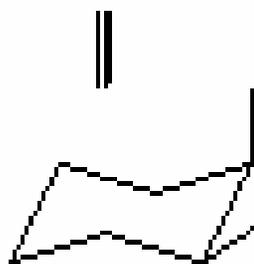
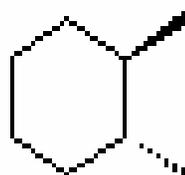
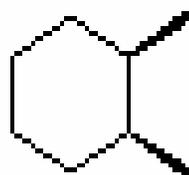




Cis-1,2-dimetilciclopentano
p.eb.=99,5° C



Trans-1,2-dimetilciclopentano
p.eb.= 91,9° C



cis(1,2-axial-equatorial)

trans(1,2-diaxial)

Cicloexanos dissubstituídos

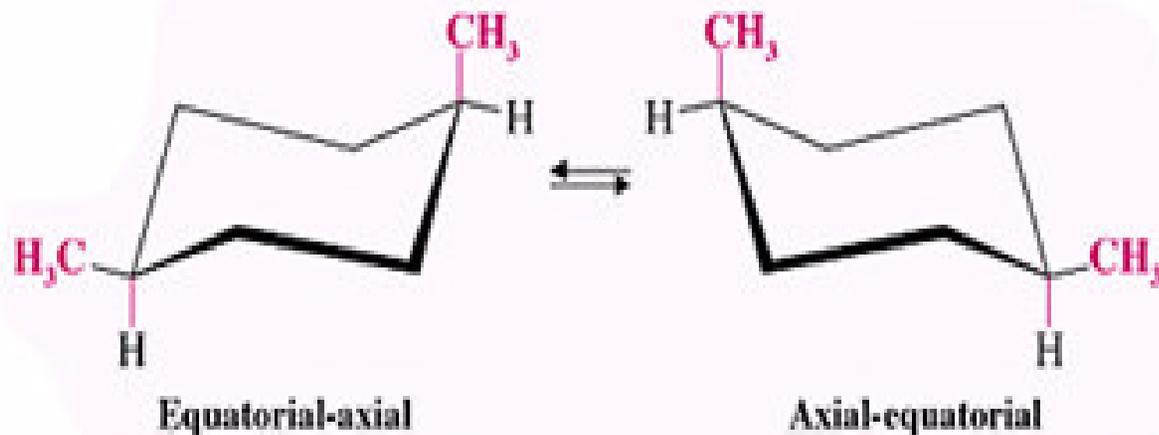
ou



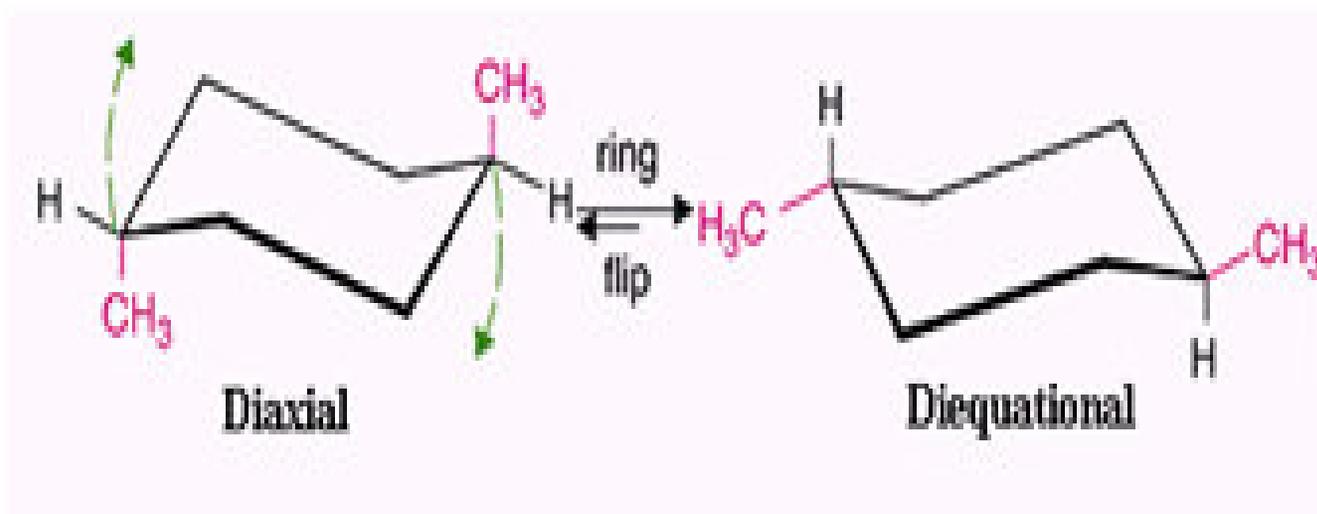
trans(1,2-diequatorial)

7.3- Análise Conformacional dos Cicloexanos Dissubstituídos:

- Para o 1,2-dimetil-cicloexano, existem dois isômeros, o *cis*-1,2-dimetilcicloexano e o *trans*-1,2-dimetilcicloexano, que não se interconvertem facilmente e precisam ser considerados separadamente. As conformações para o *cis* estão representadas abaixo, e têm a mesma energia porque cada uma possui um grupo metila axial e um grupo metila equatorial.



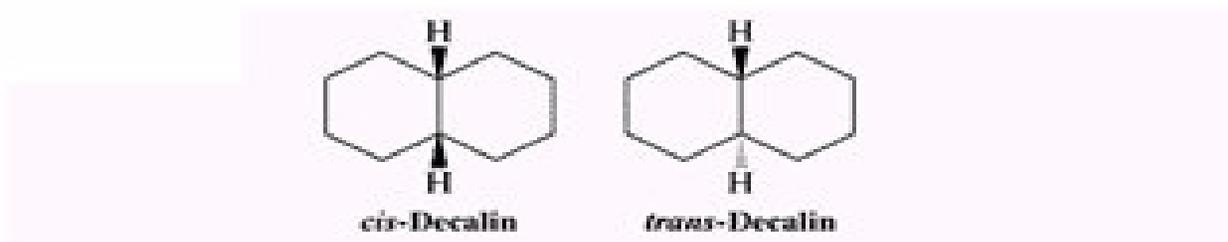
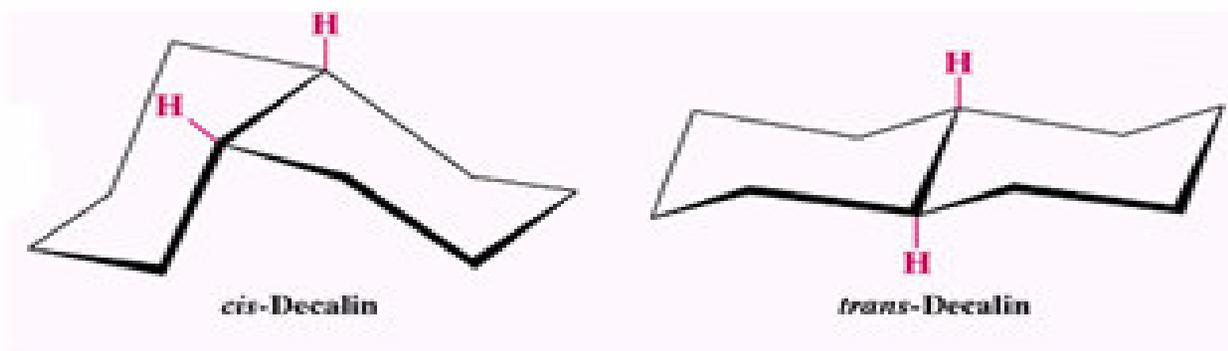
No isômero *trans*, a conformação com ambos os grupos metila equatoriais é favorecida por 2,7 kcal/mol em relação à conformação com ambos os grupos metila axiais.



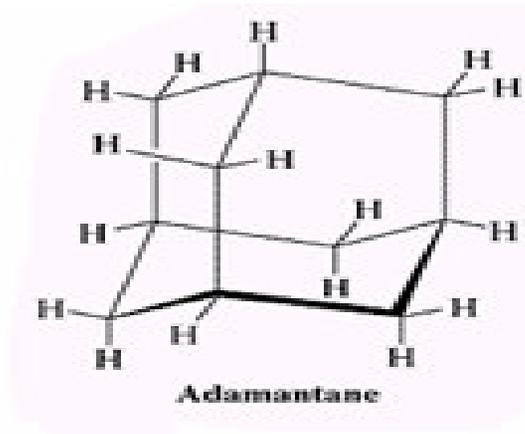
- O mesmo tipo de análise conformacional pode ser considerado para os demais cicloalcanos dissustituídos.

7.4- Alcanos Bicíclicos e Policíclicos

- Um dos mais importantes sistemas bicíclicos é o biciclo [4.4.0]decano, composto usualmente identificado pelo seu nome comum, decalina .



O adamantano é um sistema tricíclico com uma configuração tridimensional de anéis de cicloexano, todos na forma cadeira.



A extensão da estrutura numa rede tridimensional origina a estrutura do diamante:

