

II. 알케인^{Alkane}의 화학

1. 명명법
2. 알케인의 물리적 성질
3. 알케인의 형태체^{Conformation} 분석

1. 명명법-IUPAC system

(1) 사슬형 알케인의 명명법

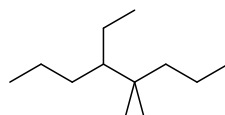
1) IUPAC system의 기본구조 및 주사슬의 결정

접두어¹Prefix – 작용기²Locant – 모체³Parent – 접미어³Suffix

가장 긴 사슬이 모체³주사슬가 된다. 치환기가 없는 경우에는 접미어가 -ane이다.

2) 치환기의 결정

- i) 주사슬 외의 나머지 가지들은 모두 치환기로 취급한다. 알케인이 치환기인 경우에는 -ane 대신에 -yl^{알킬}을 접미어로 붙인다.
- ii) 동일 치환기가 여러 개 치환된 경우에는 이를 접두어^{di, tri, tetra}로 표현한다.
- iii) 주사슬에 치환기가 치환된 위치를 숫자로 표시한다. 최대한 숫자가 작게 배정⁴되도록 1번 탄소를 결정한다.
- iv) 서로 다른 치환기가 둘 이상인 경우에는 알파벳 순⁵으로 나열한다.

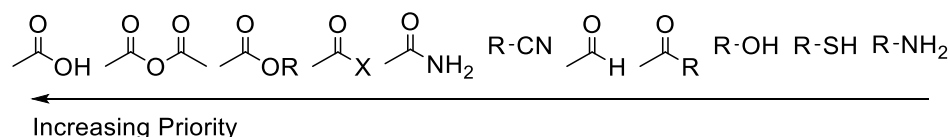


5-ethyl-4,4-dimethyloctane

¹ 편광회전방향, 절대배위, 치환체의 종류, 개수, 모체에 연결된 위치를 표시하는 자리

² 모체에 결합한 작용기의 위치 및 작용기의 이름

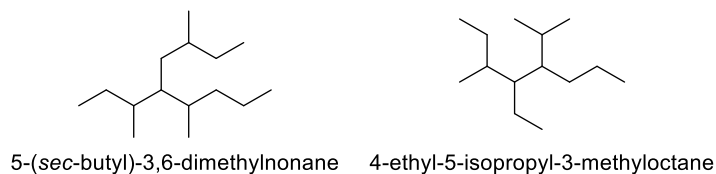
³ 모체 화학종의 이름, 우선순위가 높은 치환기를 기준으로 결정한다. 우선순위가 높은 치환기가 있다면 그 치환기의 치환된 사슬이 주사슬이 된다.



⁴ 우선순위가 높은 치환기에 숫자가 최대한 작게 배정되도록 1번 탄소를 결정한다.

⁵ *sec*, *tert*는 탄소의 차수를 나타내는 표현이며 *di*, *tri*, *tetra*는 치환기의 개수를 나타내는 표현이므로 알파벳 순서를 판단할 때 고려하지 않는다. *Iso*, *neo*, *cyclo*는 알파벳 순서를 판단할 때 고려한다.

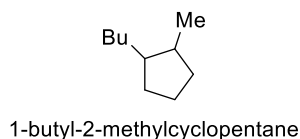
예시:



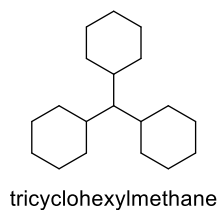
(2) 고리형 알케인의 명명법

기본적인 골자는 사슬형 알케인과 동일하다.

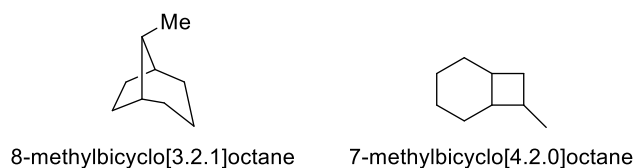
- i) 다만 접두사로 Cyclo를 붙인다. 따라서 일반적으로 Cycloalkane이라 칭한다.
- ii) 치환기가 하나인 경우에는 숫자를 생략한다.
- iii) 치환기가 둘 이상인 경우에는 최대한 숫자가 작게 배치하되, 만일 숫자가 동일하게 붙는다면 먼저 오는 주작용기에 작은 숫자가 붙도록 한다.



- iv) 치환기의 탄소수가 고리보다 많으면 고리를 치환기로 간주한다. 복수개의 고리가 있음에도 모체를 특정할 수 없는 경우에도 치환기로 취급한다.



참고: 이중고리 화합물 - 다리걸친고리(Bridgehead ring)와 접합고리(Fused Ring)



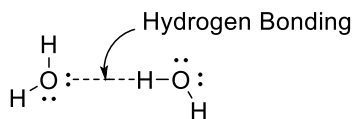
2. 알케인의 물리적 성질

(1) 분자간의 인력

1) 수소결합(Hydrogen Bond)

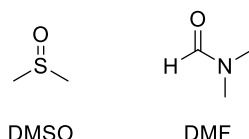
특히 강력한 분자간 상호작용으로 전기음성도가 큰 원자에 결합한 수소(δ^+)와 전기음성도가 큰 원자(δ^-) 사이의 상호작용이다. 수소 원자의 크기가 매우 작으므로, 전하가 충분히 가깝게 접근할

수 있기 때문에 이중극자 사이의 상호작용 중 가장 강한 상호작용⁶이다.



2) 이중극자-이중극자 사이의 상호작용 Dipole-Dipole interaction

분자 내의 항시적인 전하 편재로 인하여 나타나는 이중극자 간의 인력 내지는 반발력을 의미⁷한다. 극성분자 Polar molecule 간에 인력이 발생하는 원인이다. 극성분자의 대표적인 예시로 Aceton, DMSO, DMF등이 있다.



3) Van Der Waals Forces

비극성분자 사이에 나타나는 상호작용으로, 전자밀도의 일시적인 편재에 의해 유발되는 일시적인 쌍극자(유발쌍극자 Induced Dipole)가 그 원인이다. 분자간의 거리의 6승에 반비례하는 힘들을 모두 포함한다.

Van Der Waals Forces는 i) 분자의 표면적이 증가할수록 (사슬이 길수록, 곁가지가 적을수록) ii) 편극성⁸이 큰 원자에 해당할수록 그 크기가 증가한다.

(2) 끓는점

1) 알케인의 경우

i) 사슬이 길어질수록 ii) 곁가지가 적을수록 끓는 점이 증가한다.

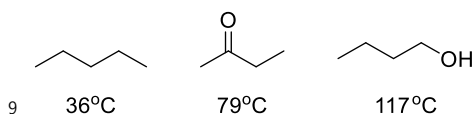
2) 분자량이 비슷하나 작용기가 다른 경우

분자간의 힘을 기준으로 판단한다. 통상적으로 수소결합 > 이중극자 간의 상호작용 > Van Der Waals force 순⁹으로 크다고 볼 수 있다¹⁰.

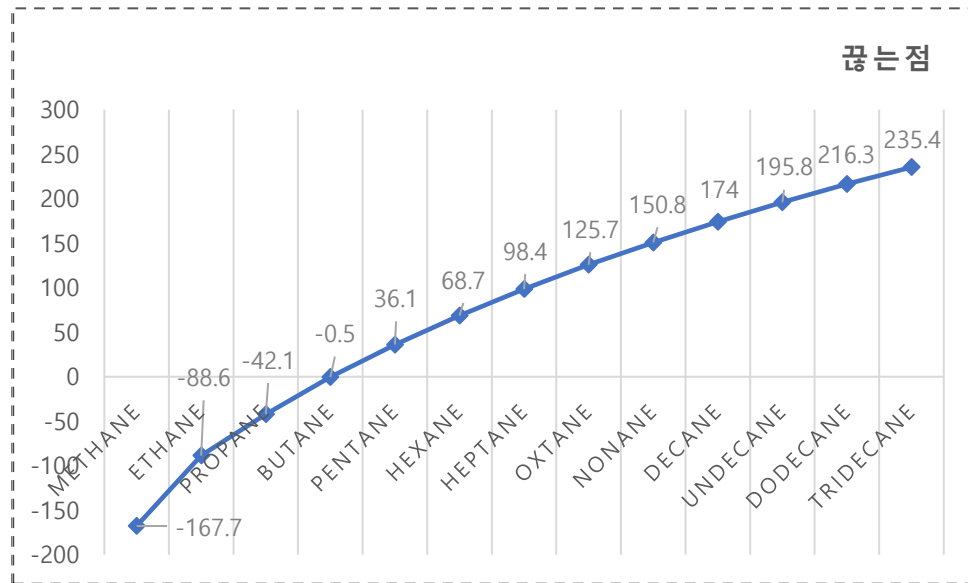
⁶ 물에서 대략 5kcal/mol정도 안정화된다.

⁷ 대략 0.5에서 2 kcal/mol 정도의 안정화가 이루어진다.

⁸ 외부 전기장의 변화에 대응하는 전자의 능력을 의미한다. 외부에서 하전된 입자가 접근할 시에 분자의 표면에 위치한 전자들이 하전된 입자에 반응하여 편재되는 경향을 보인다. 통상적으로 원자의 반지름이 클수록 편극성이 증가한다. 할로젠화 화합물의 경우 $CF_4 < CCl_4 < CBr_4 < Cl_4$



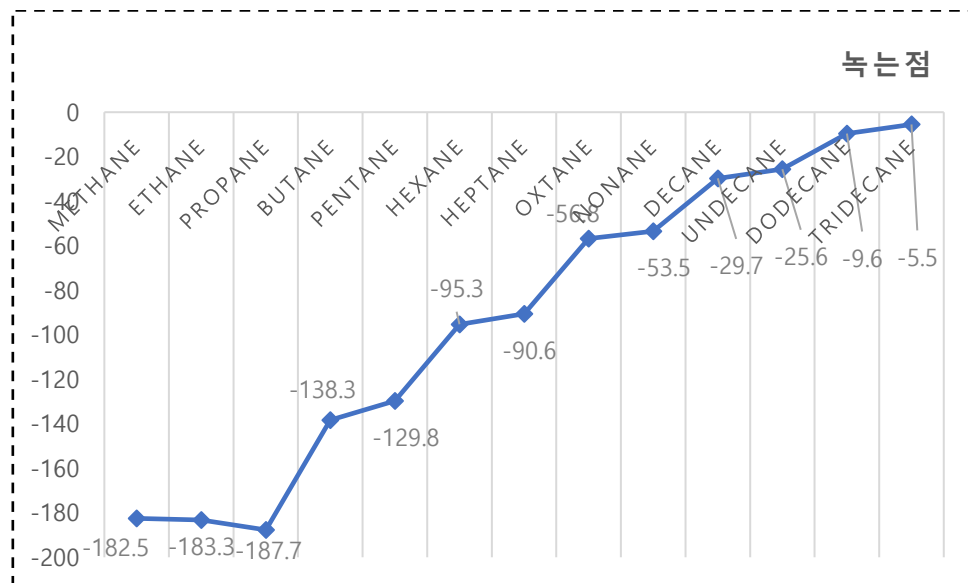
¹⁰ 다만, DMSO_{189C}나 DMF_{152C}와 같이 극단적으로 전자가 편재된 구조에서는 이중극자 간의 상호작용이 통상의 수소결합 보다 더 강하게 나타난다.



(3) 녹는점

1) 알케인의 경우

i) 화합물의 대칭성이 클수록 결정격자를 잘 채우므로 더 녹는점이 높다. ii) 특히 사슬형 알케인의 경우에는 짝수개가 홀수개에 비해 결정격자를 잘 채우므로 아래와 같이 특이적인 경향이 나타난다.



2) 분자량이 비슷하나 작용기가 다른 경우

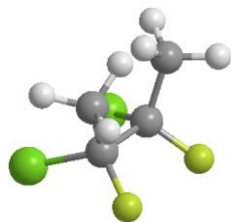
분자간의 힘을 기준으로 판단한다. 통상적으로 수소결합 > 이중극자 간의 상호작용 > Van Der Waals force 순으로 크다고 볼 수 있다.

3. 알케인의 형태체 분석

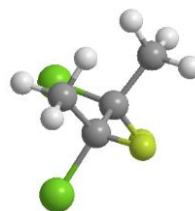
(1) 형태체의 정의

σ bond가 자유로이 회전할 수 있어서 나타나게 되는 일시적인 구조이다. 크게 엇갈린 형태 Staggered conformation과 가리워진 형태 Eclipsed conformation가 있다. 일반적으로 Staggered conformation이 더 안정하다.

Eclipsed conformaiton



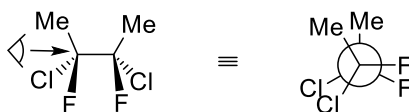
Staggered Conformation



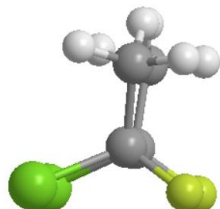
(2) 뉴먼 투영도 Newmann Projection - 형태체를 분석하는 도구

회전이 일어나는 σ bond를 곧바로 보는 방식이다. 가령 Eclipsed conformation을 Newmann 투영도로 그리면 아래와 같다.

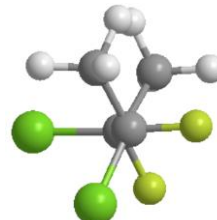
Eclipsed Conformation



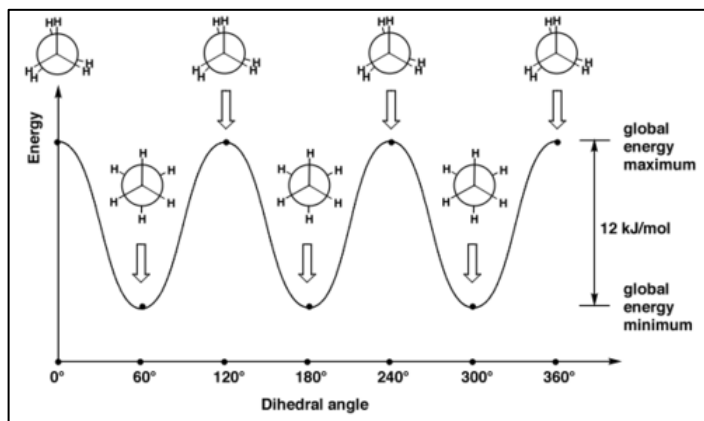
Eclipsed conformaiton



Staggered Conformation



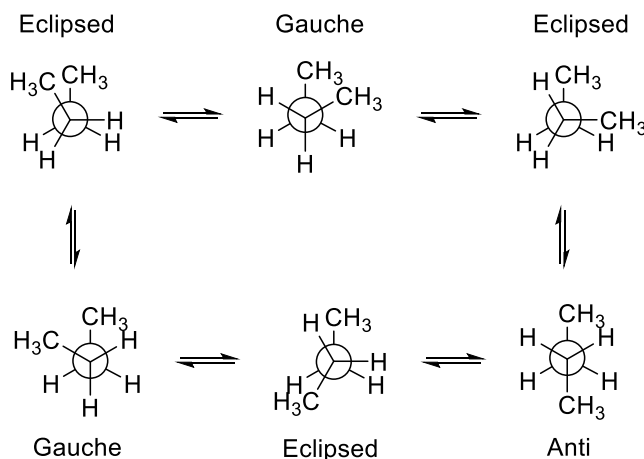
가령 에테인 Ethane의 Conformation 변화에 따른 분자의 안정도 변화를 아래와 같이 분석할 수 있다. Eclipsed conformation이 상대적으로 불안정한 이유는 Steric effect에서 찾을 수 있다. H atom



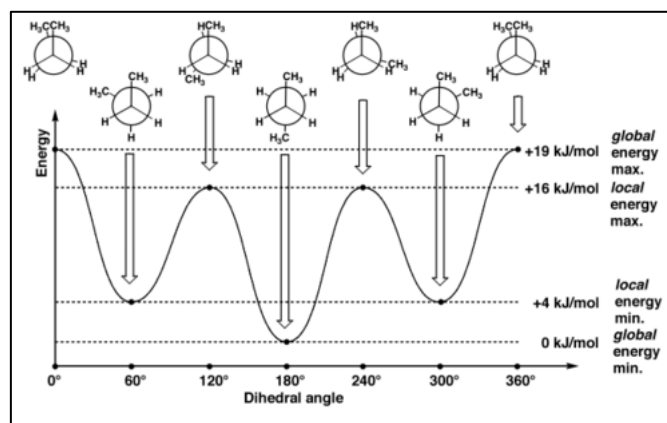
이 서로에게 가까워지면서 발생하는 Steric Strain과 σ bond가 비틀리며 발생하는 Torsional Strain 등이 Steric effect의 고려요소이다.

(3) 복잡한 형태체의 분석 - 뷰테인^{Butane}

뷰테인에는 물리적 크기가 큰 치환기가 둘 달려 있다. 때문에 이 두 치환기가 얼마나 가까운지 또한 고려하여야 한다. 부피가 큰 두 치환기가 Staggered 위치에 있는 경우를 Gauche conformation이라고 하며, 서로 정반대에 있을 때를 Anti Conformation이라고 한다.



상호작용	불안정 정도 (Kcal/mol)	불안정 정도(KJ/mol)
Me-Me Gauche	0.9	3.8
H-H Eclipsing	1.0	4.2
H-Me Eclipsing	1.4	5.8
Me-Me Eclipsing	2.5	11



통상적으로 Anti conformation이 Gauche conformation에 비하여 더 안정하나 아래와 같이 추가적인 분자내 상호작용이 가능한 경우에는 Gauche conformation이 더 안정할 수도 있다.

