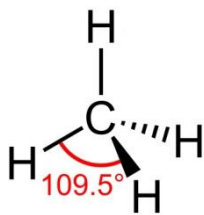
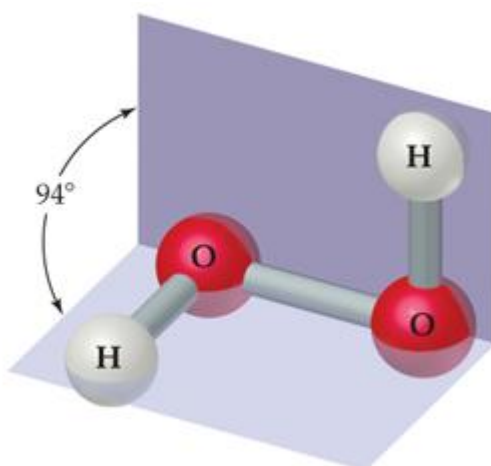


**Vazebný úhel** je nám dobře znám – **je určen trojicí atomů** a například v methanu (i dalších nasycených uhlovodících) je úhel H–C–H přibližně  $109,5^\circ$ .

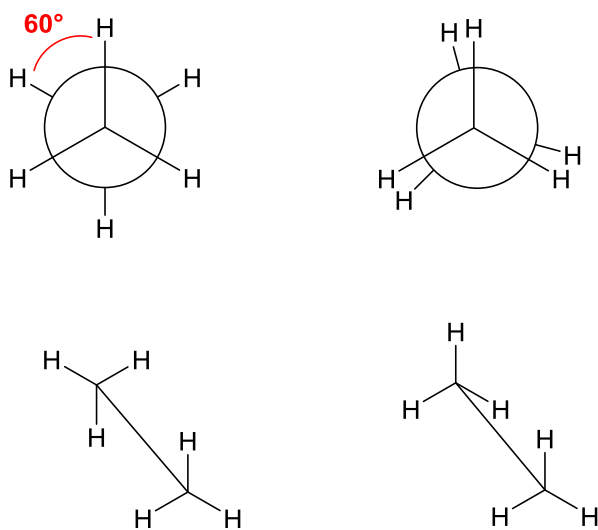


**Dihedrání úhel**: máme-li atomy navázané v pořadí A–B–C–D, pak dihedrání úhel definujeme jako **úhel mezi dvěma rovinami**, přičemž první rovina je určena atomy A, B, C a druhá rovina je určena atomy B, C, D. Například v molekule peroxidu vodíku je dihedrání úhel takový úhel, který svírají roviny určené atomy  $H^1$ , O, O a O, O,  $H^2$  a je roven hodnotě  $94^\circ$ . Celkově je tedy dihedrání úhel **určen čtveřicí atomů** (v případě peroxidu vodíku atomy H, O, O, H).

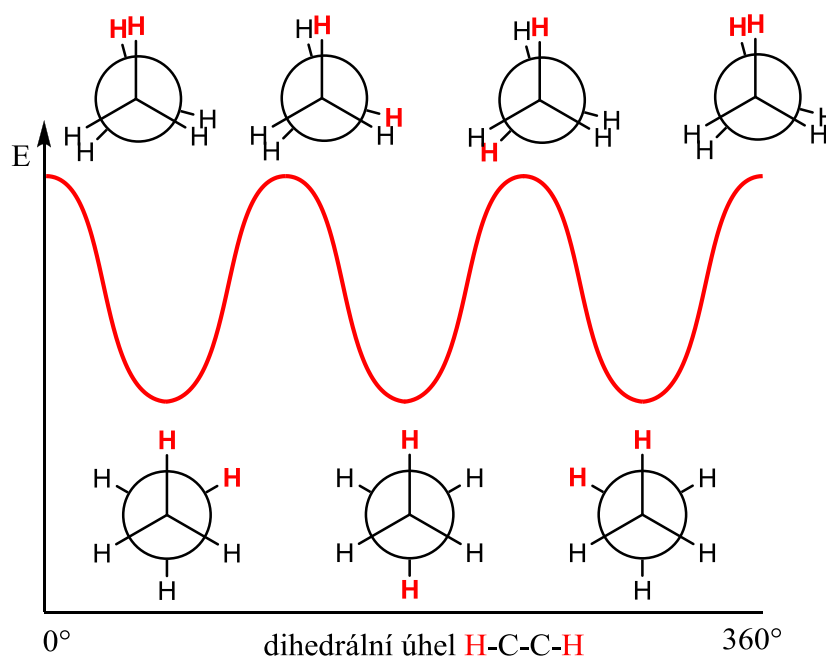


[http://wpscms.pearsoncmg.com/wps/media/objects/3662/3750354/Aus\\_content\\_19/Fig19-15.jpg](http://wpscms.pearsoncmg.com/wps/media/objects/3662/3750354/Aus_content_19/Fig19-15.jpg)

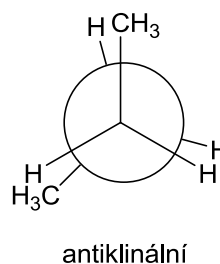
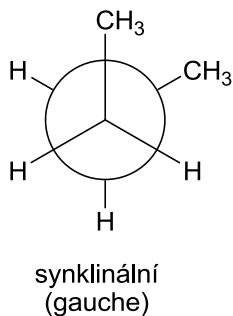
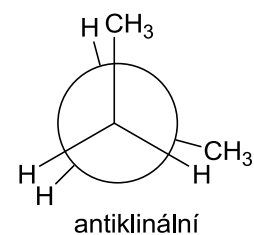
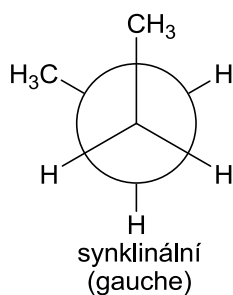
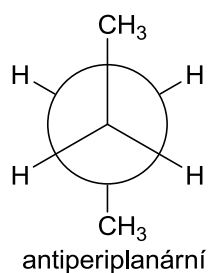
Dihedrání úhel H–C–C–H v ethanu v **zákrytové konformaci** je  $0^\circ$ . V konformaci střídavé to je  $60^\circ$ . Dihedrání úhel lze odečíst například z Newmanovy projekce popřípadě ze vzorců, které s jistou dávkou imaginace připomínají kozu na řezání dřeva (anglicky saw-horse formula).

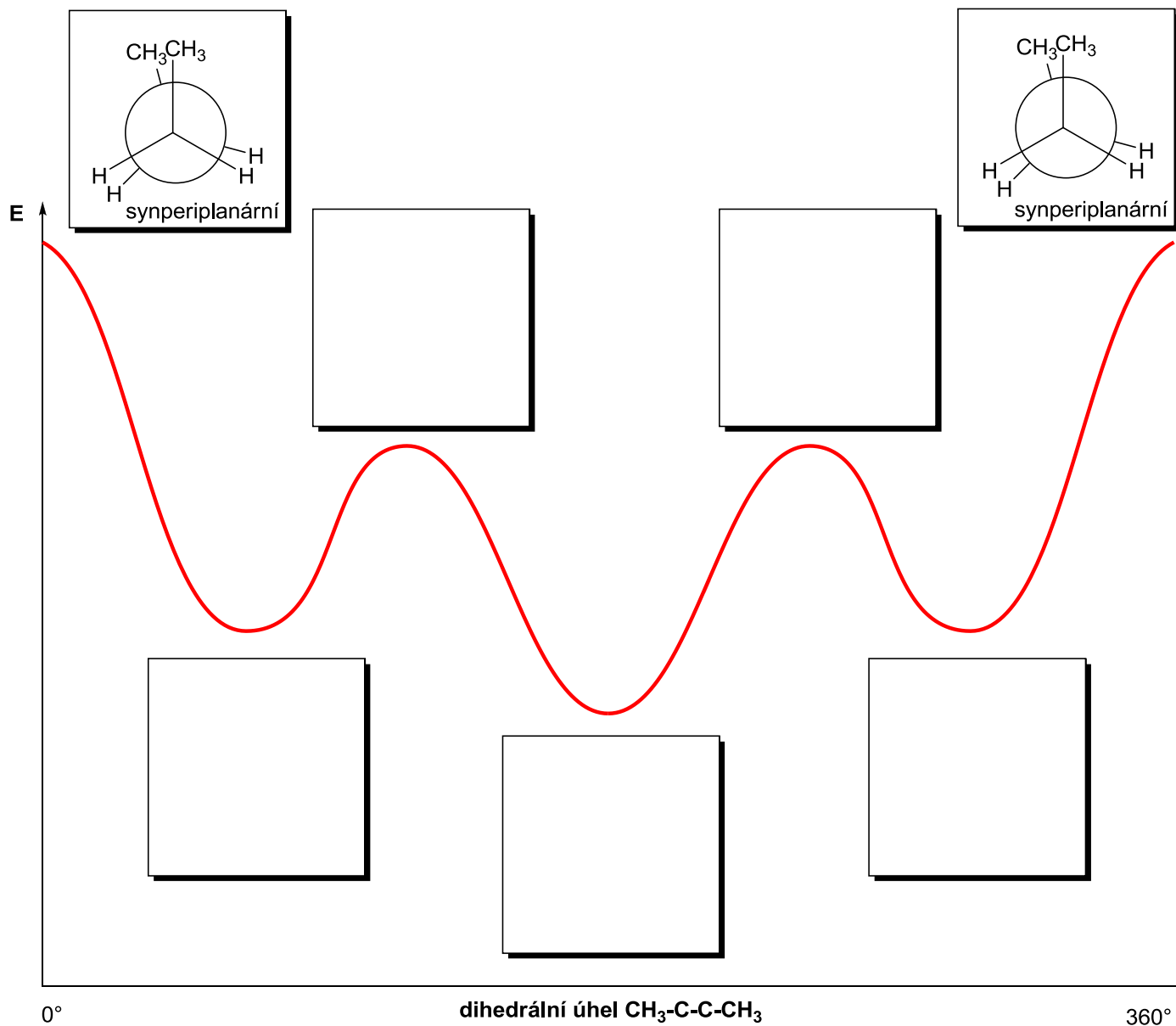


Pro ethan vypadá závislost energie na dihedrálním úhlu následovně. Abychom mohli sledovat změnu dihedrálního úhlu, jeden vodík jsme barevně označili. Jednotlivé vodíky jsou však pochopitelně nerozlišitelné, a proto významné konformace jsou pouze dvě - střídává a zákrytová.



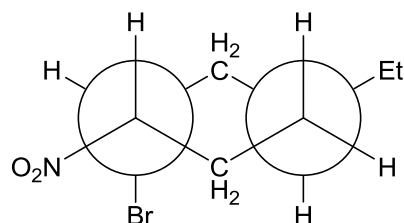
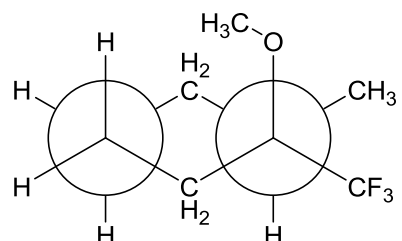
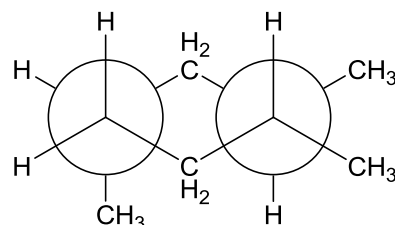
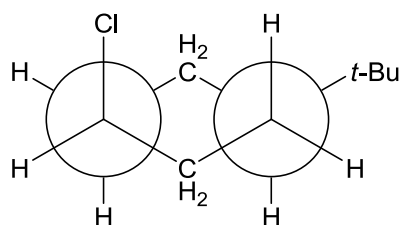
V případě butanu přichází v úvahu hned několik významných konformací. Nepřekvapí, že konformace, kde jsou koncové metyly v zákrytu (nazývaná **synperiplanární**; dihedrální úhel  $\text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{CH}_3$  je roven  $0^\circ$  resp.  $360^\circ$ ), má nejvyšší energii. **Pokuste se doplnit zbylých pět konformací do vyznačených energetických maxim/minim.** Pomoci Vám může mimojiné právě dihedrální úhel. [gauche: čti goš]





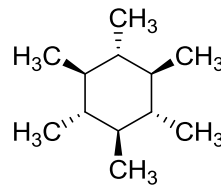
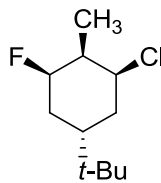
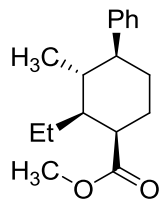
Níže uvedené Newmanovy vzorce znázorňují deriváty cyklohexanu v nejstabilnější konformaci. Pokuste se překreslit tyto vzorce do strukturálního konformačního vzorce (klasická „židlička“). S přihlednutím k  $\Delta G^0$  hodnotám si můžete ověřit, zda se skutečně jedná o nejstabilnější konformace.  $\Delta G^0$  [kJ/mol]; K=[ax/eq]:

CH <sub>3</sub> = 7,3	<i>t</i> -Bu = 20	CH <sub>3</sub> O = 2,7	CF <sub>3</sub> = 10	Cl = 2,4	Br = 2,8	NO <sub>2</sub> = 5	Et = 7,5
-----------------------	-------------------	-------------------------	----------------------	----------	----------	---------------------	----------



Nakreslete v nejstabilnější konformaci:  $\Delta G^0$ [kJ/mol]; K=[ax/eq]:

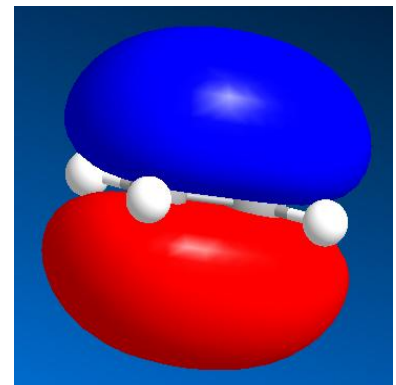
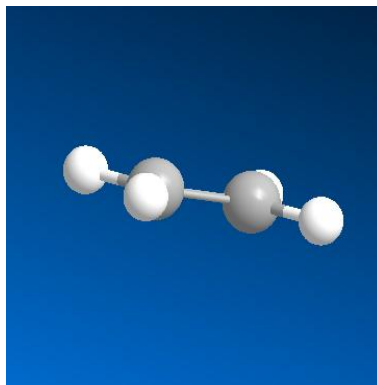
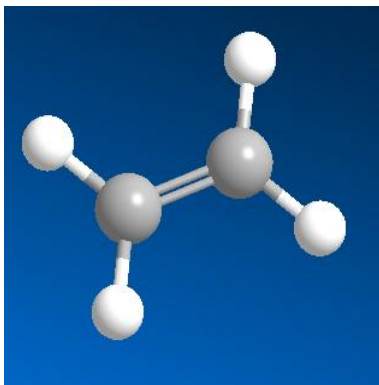
CH <sub>3</sub> = 7,3	<i>t</i> -Bu = 20	COOCH <sub>3</sub> = 2,7	Ph = 12	Cl = 2,4	F = 1,5	Et = 7,5
-----------------------	-------------------	--------------------------	---------	----------	---------	----------



Vysvětlete pojmy:

*konstituce, konformace, konfigurace, stereoizomer*

Kolem jednoduché vazby lze rotovat. U dvojné vazby toto neplatí. Kvůli  $\pi$ -vazbě je rotace znemožněna (překryvem p-atomových orbitalů vzniká vazebný molekulový orbital, který je na obrázku vpravo). Na scénu přichází pojem konfigurace...



Určete konfiguraci uvedených (hypotetických) molekul:

