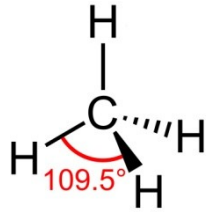
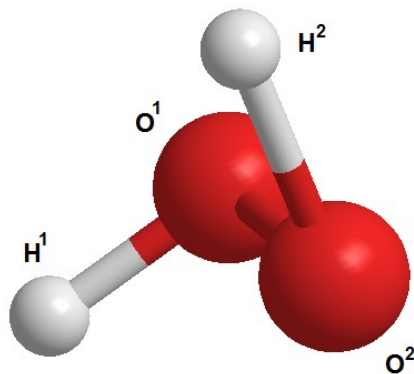


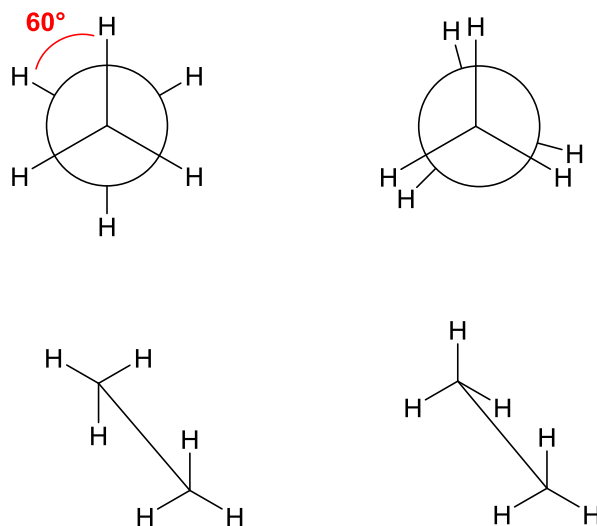
**Vazebný úhel je určen trojicí atomů** a například v methanu (i dalších nasycených uhlovodících) je úhel H-C-H přibližně  $109.5^\circ$ .



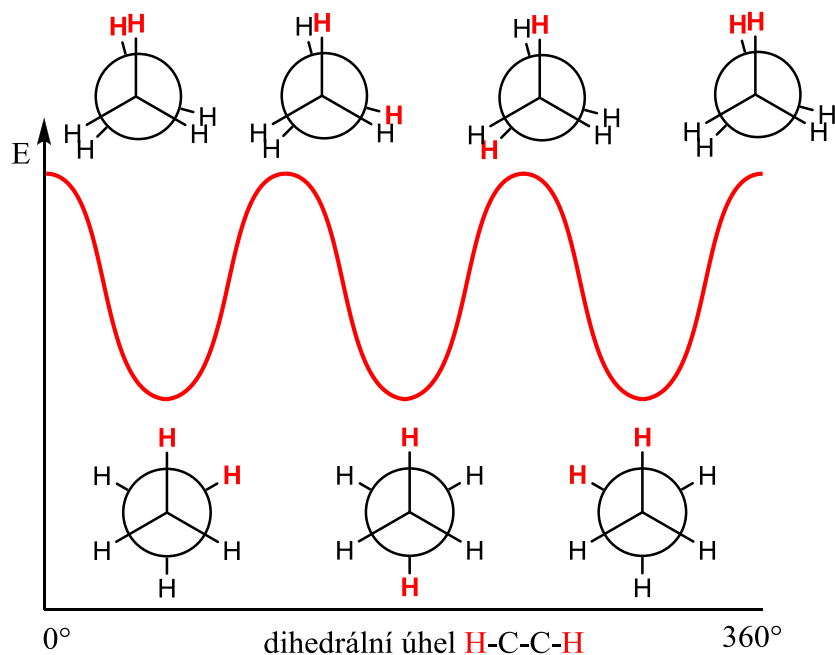
**Dihedrání úhel:** máme-li atomy navázané v pořadí A-B-C-D, pak dihedrání úhel definujeme jako **úhel mezi dvěma rovinami**, přičemž první rovina je určena atomy A, B, C a druhá rovina je určena atomy B, C, D. Například v molekule peroxidu vodíku je dihedrání úhel takový úhel, který svírají roviny určené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



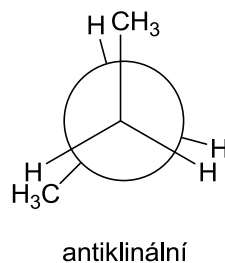
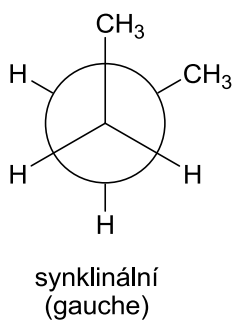
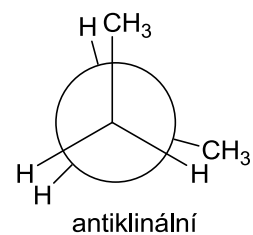
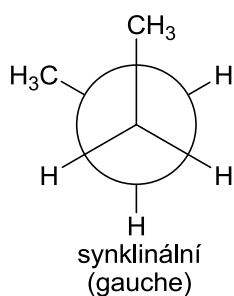
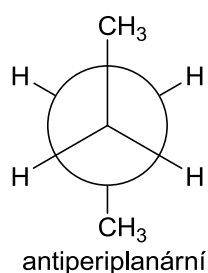
Dihedrání úhel H-C-C-H v ethanu v zákrytové konformaci je  $0^\circ$ . V konformaci střídavé to je  $60^\circ$ . Dihedrání úhel lze odečíst například z Newmanovy projekce popřípadě z perspektivních vzorců (perspektivní vzorce se anglicky někdy označují jako saw-horse formula).

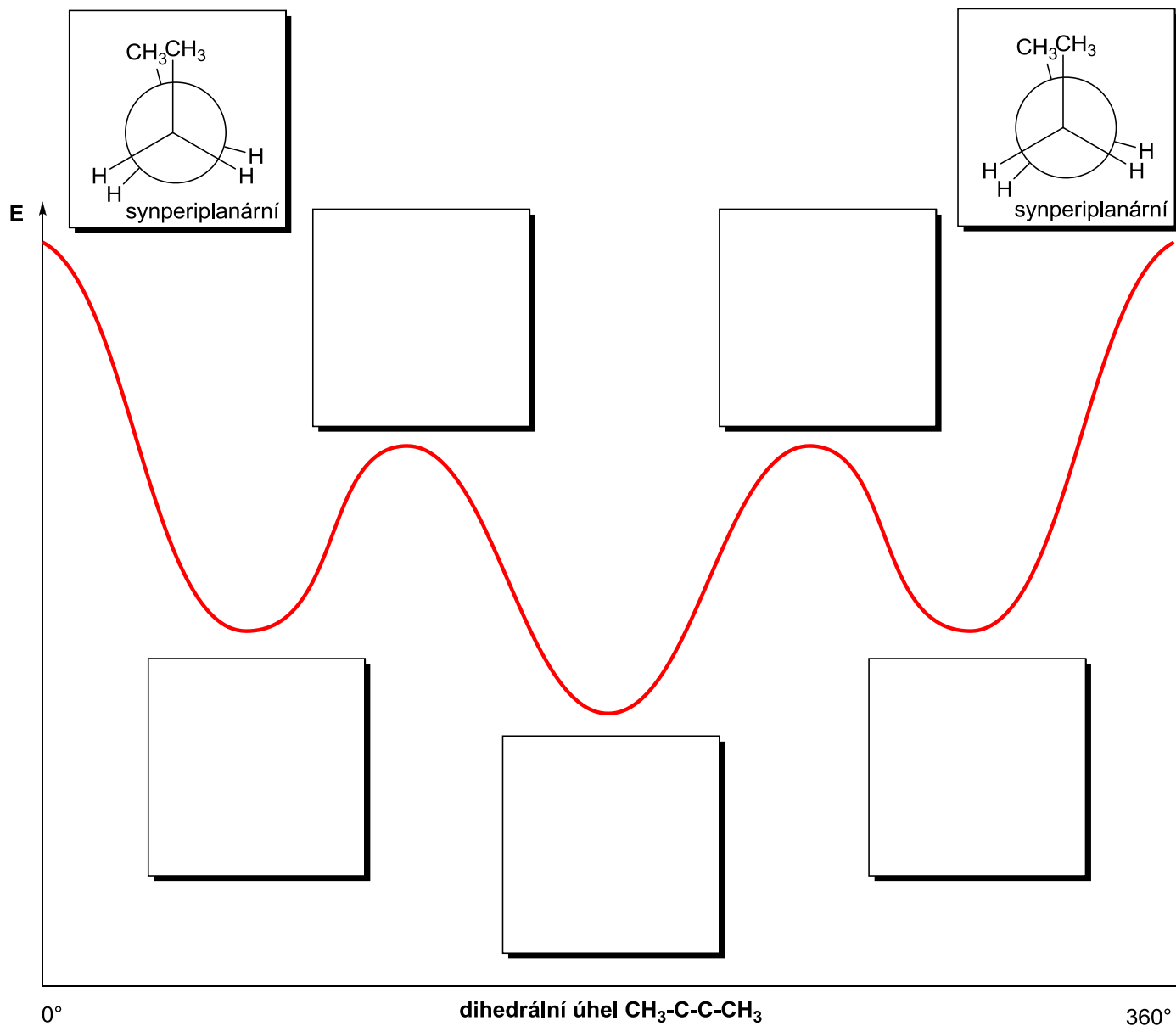


Pro ethan vypadá závislost energie na dihedráním úhlu následovně. Abychom mohli sledovat změnu dihedráního úhlu, jeden vodík jsme barevně označili. Jednotlivé vodíky jsou však pochopitelně nerozlišitelné, a proto významné konformace jsou pouze dvě - střídavá a zákrytová.



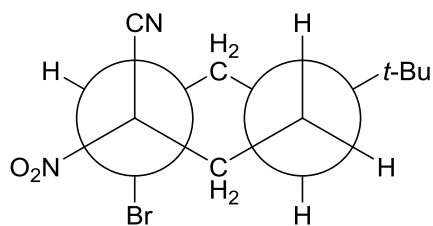
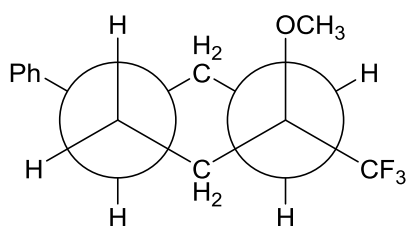
V případě butanu přichází v úvahu hned několik významných konformací. Nepřekvapí, že konformace, kde jsou koncové methyly v zákrytu (nazývaná **synperiplanární**; dihedrání úhel  $\text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{CH}_3$  je roven  $0^\circ$  resp.  $360^\circ$ ), má nejvyšší energii. **Pokuste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





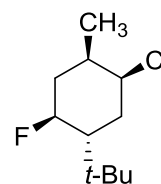
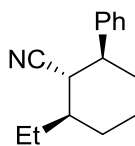
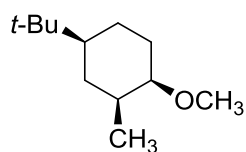
Níže uvedené Newmanovy vzorce znázorňují deriváty cyklohexanu v nejstabilnější konformaci. Pokuste se překreslit tyto vzorce do strukturního konformačního vzorce (klasická „židlička“) a také do klínkového vzorce. S přihlednutím k  $\Delta G^0$  hodnotám si můžete ověřit, zda se skutečně jedná o nejstabilnější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

$t\text{-Bu} = 20$	$\text{Ph} = 12$	$\text{CH}_3\text{O} = 2.7$	$\text{CF}_3 = 10$	$\text{Br} = 2.8$	$\text{NO}_2 = 5$	$\text{CN} = 0.85$
--------------------	------------------	-----------------------------	--------------------	-------------------	-------------------	--------------------

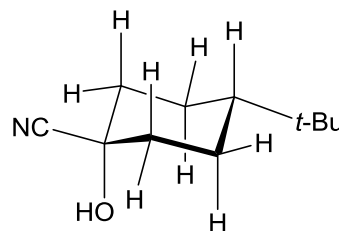
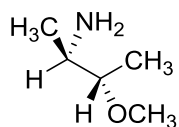


Nakreslete v nejstabilnější konformaci:  $\Delta G^0$ [kJ/mol];  $K=[ax/eq]$ :

$t\text{-Bu} = 20$	$\text{Ph} = 12$	$\text{CH}_3\text{O} = 2.7$	$\text{CH}_3 = 7.3$	$\text{Et} = 7.5$	$\text{F} = 1.5$	$\text{Cl} = 2.4$	$\text{CN} = 0.85$
--------------------	------------------	-----------------------------	---------------------	-------------------	------------------	-------------------	--------------------



Překreslete do Newmanova vzorce:



Nakreslete vzorec (1*R*,3*S*)-3-isopropylcyclohexanolu, dále nejstabilnější konformaci této látky a překreslete tuto konformaci do Newmanova vzorce.