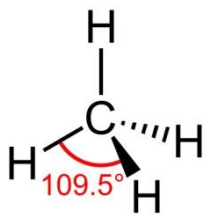
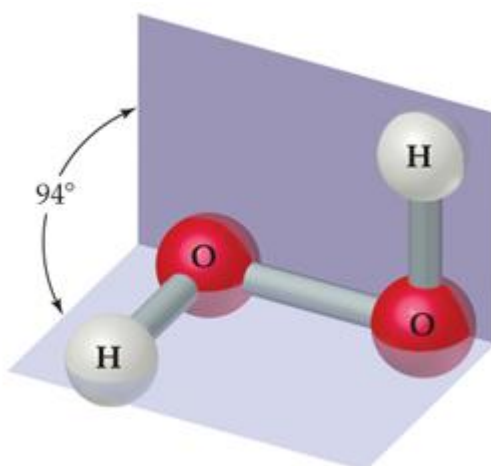


**Vazebný úhel je určen trojicí atomů** a například v methanu (i dalších nasycených uhlovodících) je úhel H–C–H přibližně  $109.5^\circ$ .

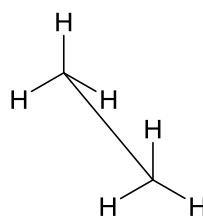
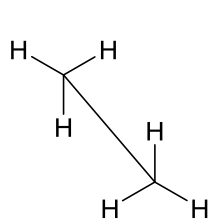
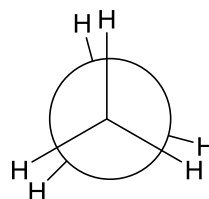
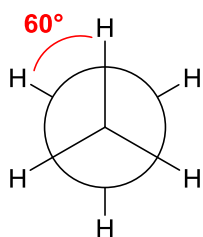


**Dihedrání úhel:** máme-li atomy navázané v pořadí A–B–C–D, pak dihedrání úhel definujeme jako **úhel mezi dvěma rovinami**, přičemž první rovina je určena atomy A, B, C a druhá rovina je určena atomy B, C, D. Například v molekule peroxidu vodíku je dihedrání úhel takový úhel, který svírají roviny určené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

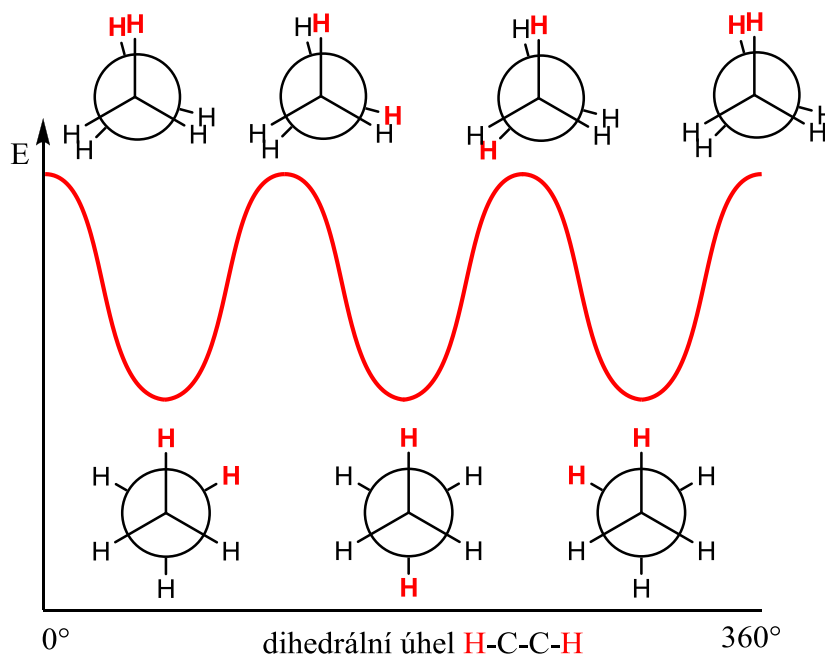


[http://wpscms.pearsoncmg.com/wps/media/objects/3662/3750354/Aus\\_content\\_19/Fig19-15.jpg](http://wpscms.pearsoncmg.com/wps/media/objects/3662/3750354/Aus_content_19/Fig19-15.jpg)

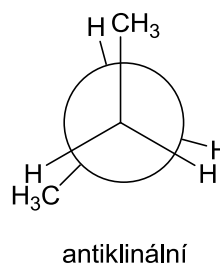
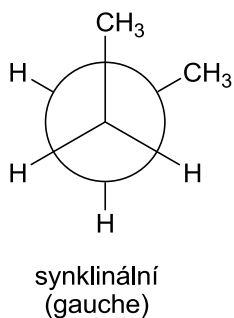
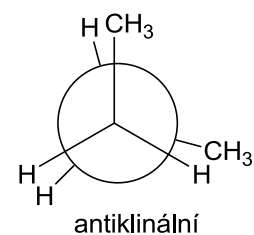
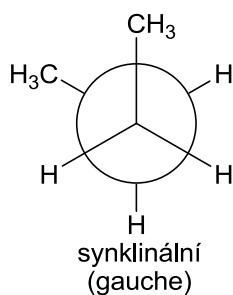
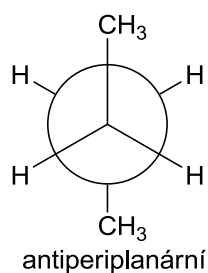
Dihedrání úhel H–C–C–H v ethanu v zákrytové konformaci je  $0^\circ$ . V konformaci střídavé to je  $60^\circ$ . Dihedrání úhel lze odečíst například z Newmanovy projekce popřípadě z perspektivních vzorců (perspektivní vzorce se anglicky někdy označují jako saw-horse formula).

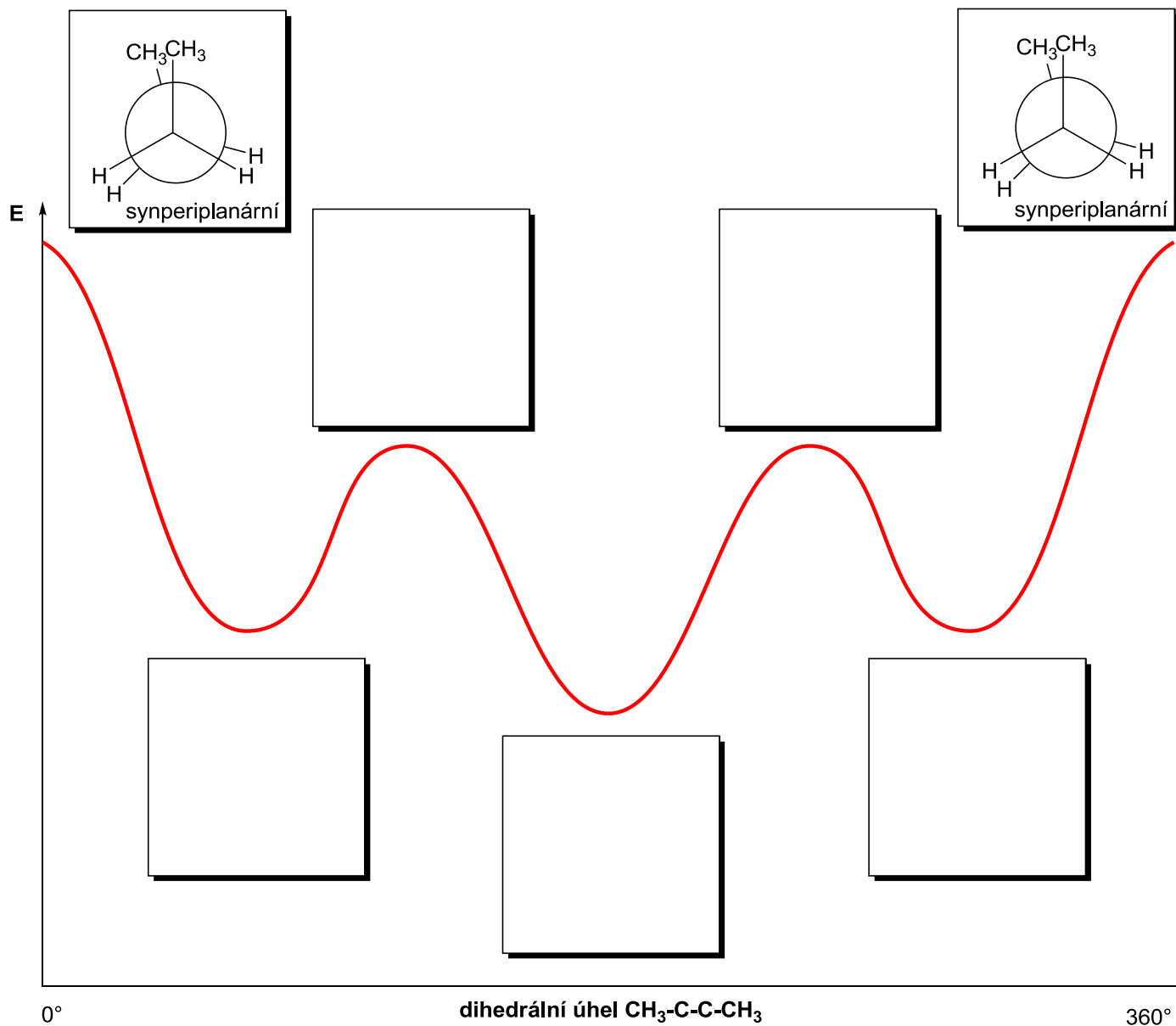


Pro ethan vypadá závislost energie na dihedralním úhlu následovně. Abychom mohli sledovat změnu dihedralního úhlu, jeden vodík jsme barevně označili. Jednotlivé vodíky jsou však pochopitelně nerozlišitelné, a proto významné konformace jsou pouze dvě - střídavá a zákrytová.



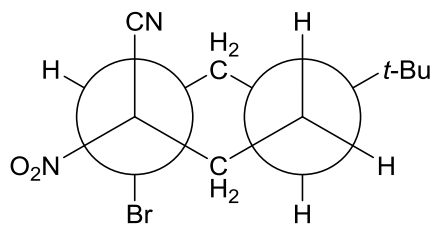
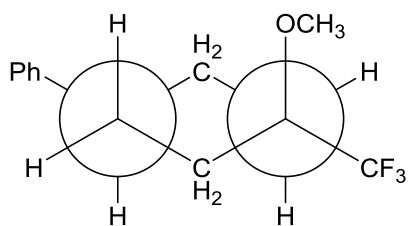
V případě butanu přichází v úvahu hned několik významných konformací. Nepřekvapí, že konformace, kde jsou koncové metyly v zákrytu (nazývaná **synperiplanární**; dihedralní úhel  $\text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{CH}_3$  je roven  $0^\circ$  resp.  $360^\circ$ ), má nejvyšší energii. **Pokuste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





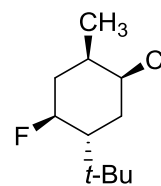
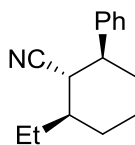
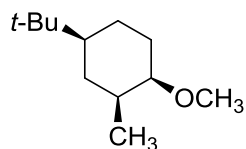
Níže uvedené Newmanovy vzorce znázorňují deriváty cyklohexanu v nejstabilnější konformaci. Pokuste se překreslit tyto vzorce do strukturního konformačního vzorce (klasická „židlička“) a také do klínkového vzorce. S přihlednutím k  $\Delta G^0$  hodnotám si můžete ověřit, zda se skutečně jedná o nejstabilnější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

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

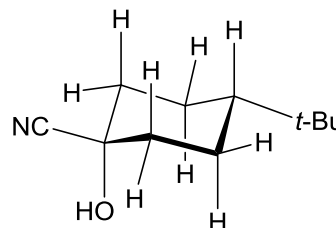
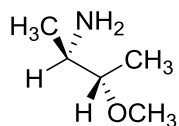


Nakreslete v nejstabilnější konformaci:  $\Delta G^0$ [kJ/mol]; K=[ax/eq]:

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



Překreslete do Newmanova vzorce:



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

