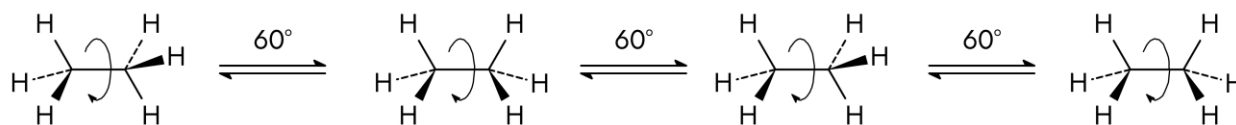


Analiza konformacyjna alkanów. Izomeria cykloalkanów. Oddziaływanie 1,3-diaksjalne.

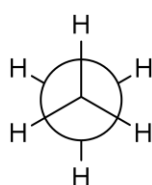
I. Analiza konformacyjna etanu i butanu. Wykres na zajęciach.

a) etan

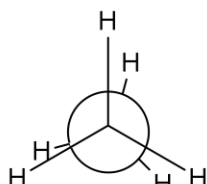


naprzemianległa

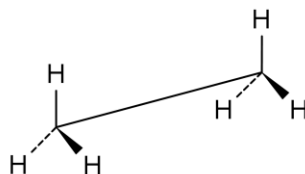
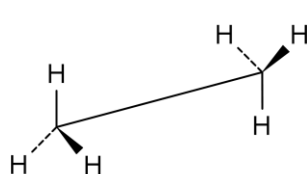
naprzeciwległa



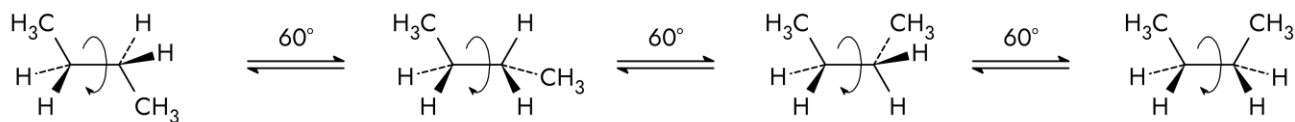
0 kJ/mol



+12 kJ/mol



b) butan

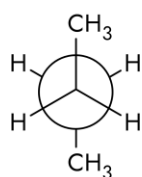


antyperiplanarna

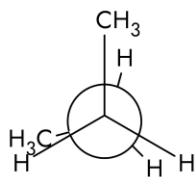
antyklinalna

syneklinalna

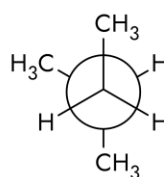
synperiplanarna



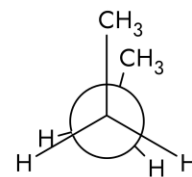
0 kJ/mol



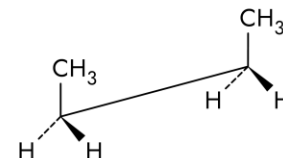
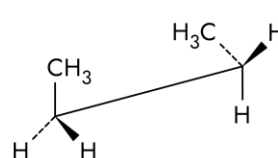
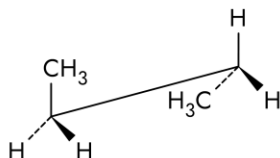
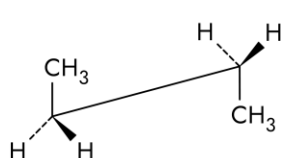
+16 kJ/mol



+3,8 kJ/mol

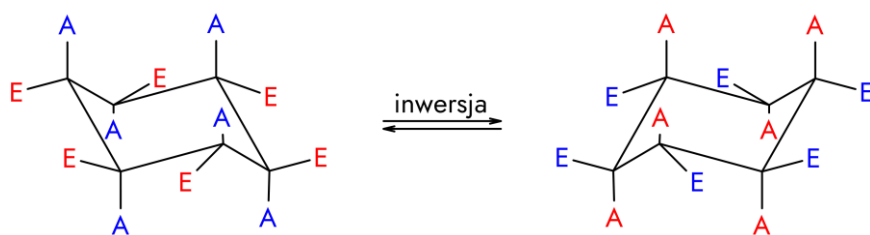


+19 kJ/mol

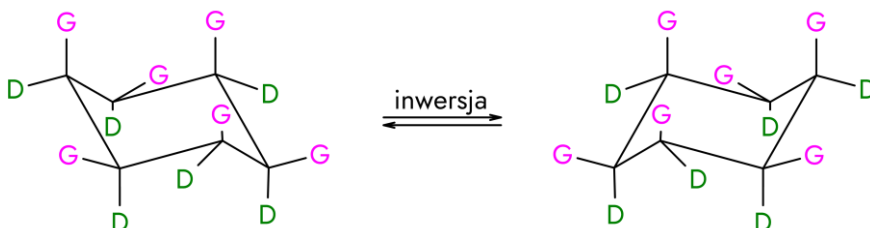


Oddziaływanie	Przyczyna	Energia [kJ/mol]
H ↔ H	Napężenie torsyjne	4,0
H ↔ CH ₃	Głównie napężenie torsyjne	6,0
CH ₃ ↔ CH ₃	Napężenie torsyjne i steryczne	11,0
CH ₃ ↔ CH ₃	Napężenie steryczne	3,8

Przydatne informacje dotyczące konformacji krzesłowej cykloheksanu i jego pochodnych.



Przy inwersji pierścienia, położenia ekwatorialne przechodzą w aksjalne, a aksjalne w ekwatorialne.

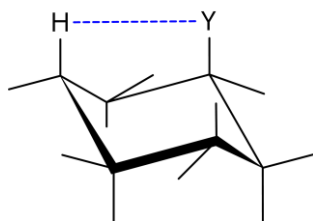


Przy inwersji pierścienia położenia „górne” pozostają „górne”, a „dolne” pozostają „dolne”.

Izomery *cis*- dalej pozostają *cis*-, izomery *trans*-, dalej pozostają *trans*-.

Izomery *cis*:- GG, DD

Izomery *trans*:- GD, DG

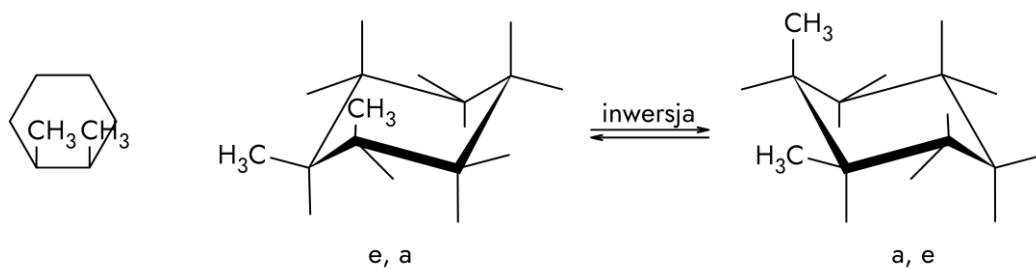


Oddziaływanie 1,3-diaksjalne w monopodstawionym (Y) cykloheksanie.

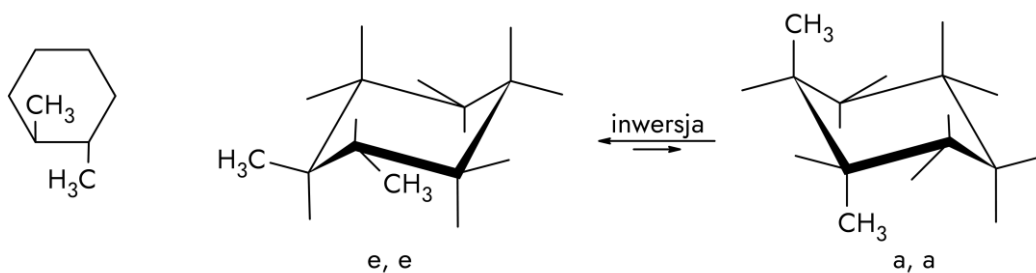
Wartość oddziaływania 1,3-diaksjalnego $H \leftrightarrow Y$										
Y	F	Cl, Br	OH	CH ₃	CH ₂ CH ₃	CH(CH ₃) ₂	C(CH ₃) ₃	C ₆ H ₅	COOH	CN
Energia [kJ/mol]	0,5	1,0	2,1	3,8	4,0	4,6	11,4	6,3	2,9	0,4

II. Narysuj wzory „płaskie” wymienionych izomerycznych dimetylocykloheksanów (pomijając enancjomery) oraz wzory konformacji krzesłowych:

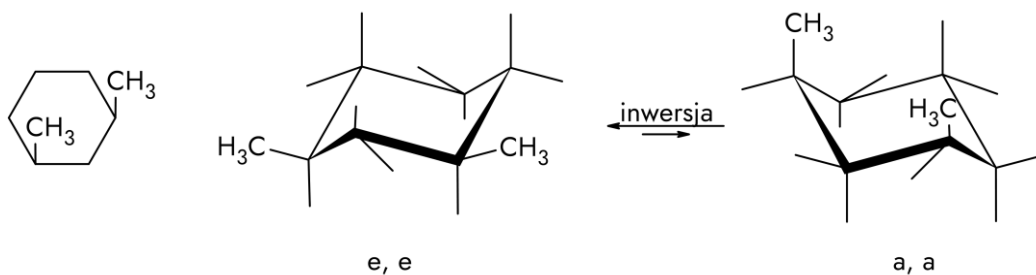
a) *cis*-1,2-dimetylocykloheksanu



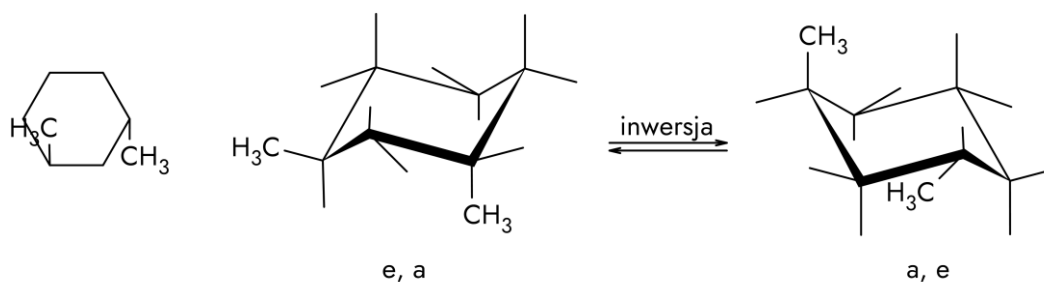
b) *trans*-1,2-dimetylocykloheksanu



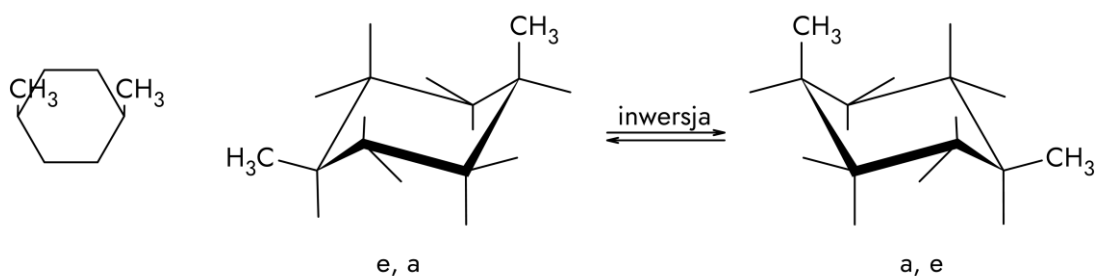
c) *cis*-1,3-dimetylocykloheksanu



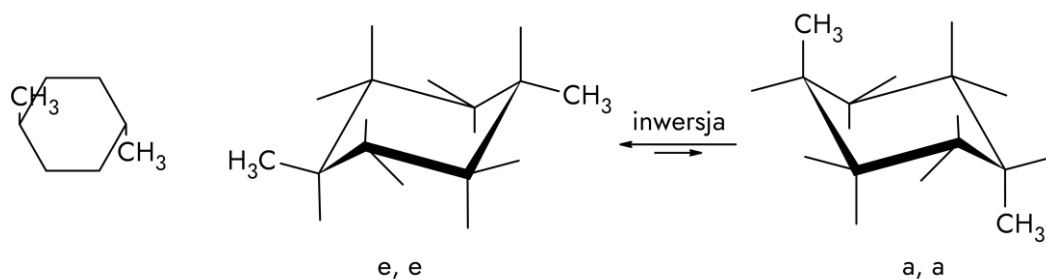
d) *trans*-1,3-dimetylocykloheksanu



e) *cis*-1,4-dimetylocykloheksanu

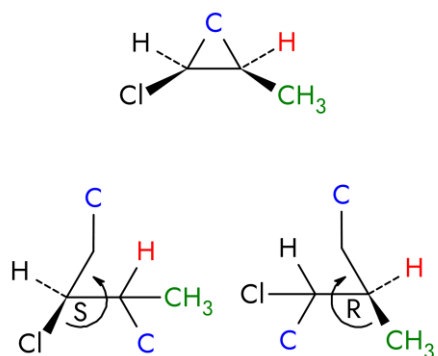
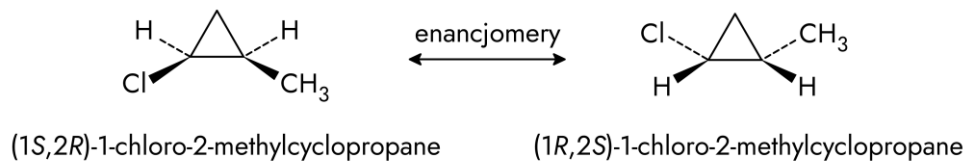


f) *trans*-1,4-dimetylocykloheksanu



Która z dwóch konformacji krzesłowych (po inwersji pierścienia) danego związku powinna być trwalsza i dlaczego?

III. Pełna analiza dla izomeru *cis*-:



IV. Rozwiązanie:

a) *trans*-1,3-dimetylocykloheksan

b) *cis*-1,2-dimetylocykloheksan

c) *trans*-1,2-dimetylocykloheksan

d) *cis*-1,3-dimetylocykloheksan

e) *trans*-1,4-dimetylocykloheksan

f) *cis*-1,4-dimetylocykloheksan

g) *trans*-1,2-dimetylocykloheksan

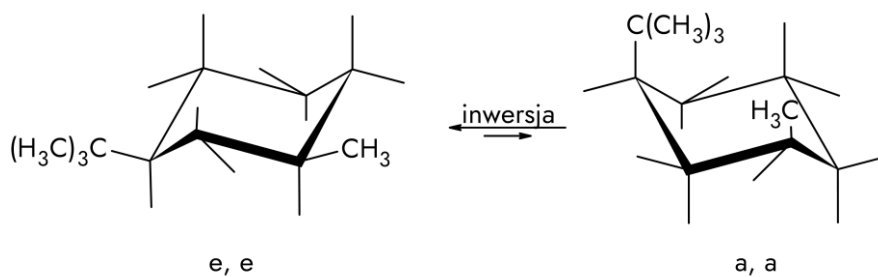
h) *cis*-1,2-dimetylocykloheksan

i) *trans*-1,3-dimetylocykloheksan

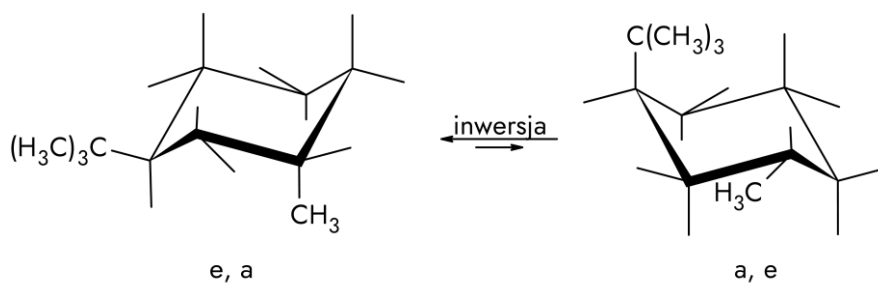
Związki chiralne to *trans*-1,3-dimetylocykloheksan (para enancjomerów A i I) oraz *trans*-1,2-dimetylocykloheksan (para enancjomerów C i G)

V. Narysuj obie konformacje (przed i po inwersji pierścienia) krzesłowe pochodnych cykloheksanu. Zaznacz który z konformerów jest przeważający w stanie równowagi (trwalszy) i dlaczego.

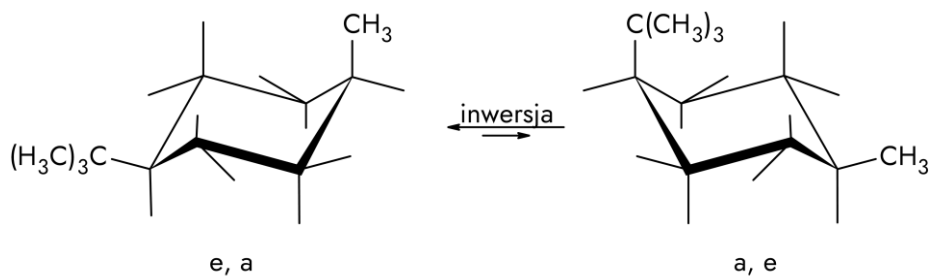
a) *cis*-1-*tert*-butylo-3-metylocykloheksan



b) *trans*-1-*tert*-butylo-3-metylocykloheksan



c) *cis*-1-*tert*-butylo-4-metylocykloheksan



d) *trans*-1-*tert*-butylo-4-metylocykloheksan

