**Je to s jednoduchou vazbou jednoduché?** *(PRACOVNÍ LIST – ŘEŠENÍ)*

**Konformace alkanů**

Kolem jednoduchých vazeb (např. v molekule ethanu) může docházet k rotaci, při které části molekul, které jsou touto vazbou spojené, zaujímají vůči sobě rozdílnou polohu. Různá prostorová uspořádání, která takto vznikají, se nazývají konformace. Porovnáváme-li dvě různé konformace téže sloučeniny, pak mluvíme o tzv. konformačních izomerech neboli konformerech.

Konformery se mohou znázornit např. perspektivním zobrazením či Newmanovou projekcí.

1. ***Na základě uvedených zobrazení molekuly ethanu slovně popište minimálně 2 rozdíly mezi oběma projekcemi. Klaďte např. důraz na způsob zapisování vazeb C‑C a C-H.***



Obrázek 9 – Perspektivní zobrazení a Newmanovy projekce ethanu (Murry)

*Perspektivní zobrazení prezentuje vazbu C-C pod šikmým úhlem a prostorovou orientaci vyznačuje uvedením všech C-H vazeb.*

*Newmanova projekce znamená, že se na molekulu díváme ve směru vazby uhlík-uhlík, tyto dva atomy uhlíku jsou proto v zákrytu a kreslíme je jako kruh. Vazby připojené k přednímu atomu uhlíku znázorňujeme čarami, které se stýkají ve středu kroužku, zatímco vazby připojené k zadnímu uhlíku zakreslujeme jako čáry končící na obvodu kroužku.*

*Dále budeme využívat mobilní aplikaci* ***ChemTube3D*** *oddíl: Structure and Bonding → Stereochemistry → Newman projection*

Návod k použití mobilní aplikace: V tomto oddílu mobilní aplikace naleznete Newmanovu projekci všech konformerů ethanu. Kliknutím na Newmanovu projekci konformeru se tento vybraný konformer objeví v interaktivním okně. Můžete si ho libovolně prohlížet a otáčet jím. Kliknutím na zahnutou šipku za Newmanovou projekcí konformeru, dojde v interaktivním okně k rotaci o určitý úhel a tak se zobrazí v interaktivním okně další konformer.

1. ***V mobilní aplikaci ChemTube3D pozorujte jednotlivé konformery ethanu. Vše si prohlédněte v interaktivním okně mobilní aplikace.***

Jak již bylo zmíněno, kolem jednoduché vazby C-C je umožněna rotace. V molekule ethanu tak dochází rotací okolo vazby C-C ke vzniku odlišných konformačních struktur. V aplikaci ChemTube3D nový konformer vznikne z výchozího rotací kolem vazby C-C o libovolný úhel. Další rotací získáváme nové konformery, dokud se celkovou rotací o 360° nedostanete k původnímu výchozímu konformeru.

1. ***Newmanovy projekce všech konformerů ethanu, které získáte rotací o 60° zakreslete do tabulky. U všech konformerů ponechte barevně (modře a zeleně) zvýrazněné vodíky.***

POZOR!!! Některé konformery v mobilní aplikaci vznikly rotací o jiný úhel než 60°. My budeme brát v úvahu pouze konformace, které vznikly rotací o 60°! To znamená, že se nad konformery musíte zamyslet a některé trochu upravit, než je vyplníte do tabulky.

(*Pozn. Následující obrázky 6, 7, 8, 9 byly vytvořeny autorkou diplomové práce.*)

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 180° | **240°** | **300°** | **360° (0°)** | **60°** | **120°** | **180°** |
|  |  |  |  |  |  |  |

Obrázek 10 – Vybrané konformery ethanu

1. ***Zamyslete se, zda budou některé konformace ethanu stabilnější. Dokážete najít souvislost mezi vzdáleností atomů a stabilitou (energetickou výhodností) konformeru?***

*Platí, že čím dále od sebe atomy nebo skupiny atomů jsou, tím menší je jejich vzájemné ovlivňování a tím je toto uspořádání energeticky výhodnější.*

1. ***Prohlédněte si jednotlivé konformery v tabulce (úkol 3) a zamyslete se nad označením ZÁKRYTOVÁ KONFORMACE a NEZÁKRYTOVÁ KONFORMACE. Zapište, v čem se tato označení liší. Zkuste jednotlivé konformery v tabulce označit za ZÁKRYTOVÉ (Z) nebo NEZÁKRYTOVÉ (N) konformace.***

*V nejstabilnější (energeticky nejchudší) konformaci je všech šest vazeb C-H od sebe maximálně vzdálených. Tuto konformaci označujeme jako NEZÁKRYTOVOU. V nejméně stabilní (energeticky nejbohatší) konformaci je naopak všech šest vazeb C-H v největší blízkosti. Tuto konformaci nazýváme ZÁKRYTOVOU.*

Pokud vyneseme závislost energie na úhlu otáčení kolem vazby C-C v ethanu získáme následující graf. Vycházíme od konformeru, kde se vazby C-**H** a C-**H** v Newmanově projekci liší o **0°**.

1. ***Kde v grafu nalezneme energie pro ZÁKRYTOVÉ A NEZÁKRYTOVÉ KONFORMACE?***



Obrázek 11 – Závislost potenciální energie na úhlu otáčení kolem vazby C-C v ethanu.

*Zákrytovým konformacím odpovídají maxima energie, střídavým konformacím minima energie. (Nezákrytové konformace mají o 12 kJ/mol nižší energii než konformery zákrytové.)*

1. ***\* Zakreslete Newmanovy projekce propanu (případně butanu), ve kterých molekula má nejnižší a nejvyšší energii.***

☺ Nápověda: postupujte obdobně jako v případě ethanu, s tím že jeden (dva) atom(y) vodíku nahraďte skupinou CH3.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **0°, 360°** | **60°** | **120°** | **180°** | **240°** | **300°** |
|  |  |  |  |  |  |

Obrázek 12 – Vybrané konformery propanu

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **0°, 360°** | **60°** | **120°** | **180°** | **240°** | **300°** |
|  |  |  |  |  |  |

Obrázek 13 – Vybrané konformery butanu