**Je to s jednoduchou vazbou jednoduché?** *(pracovní list – zadání)*

**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 14 – Perspektivní zobrazení a Newmanovy projekce ethanu (Murry)

*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.

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

1. ***Zamyslete se, zda budou některé konformace ethanu stabilnější. Dokážete najít souvislost mezi vzdáleností atomů a stabilitou (energetickou výhodností) konformeru?***
2. ***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.***

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

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.