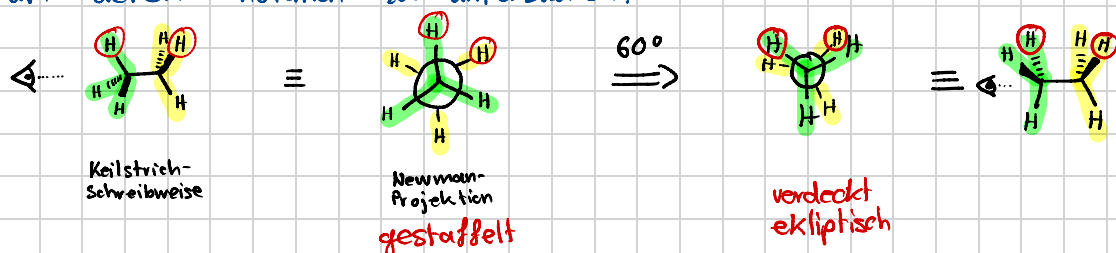


ÜS 10 - Konformationsanalyse I

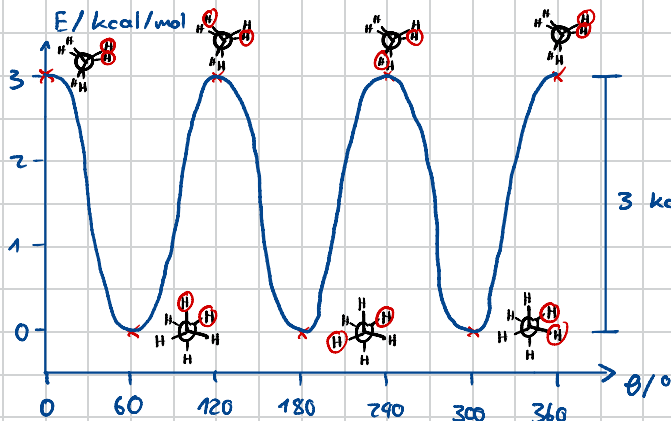
Konformationsanalyse ist ein sehr wichtiges Thema und wird in den folgenden OC-Vorlesungen immer wieder aufgegriffen, um die Stereoselektivität einer Reaktion zu erklären (vor allem in OC III). Konformationsanalyse beschäftigt sich mit der Rotation von Einzelbindungen.

Newman-Projektion

Bei der Newman-Projektion wird eine C-C-Bindung frontal betrachtet, um deren Rotation zu untersuchen.



Wenn wir die Einzelbindung jetzt drehen in der Newman-Projektion fixieren wir das hintere C und rotieren das vordere C gegen den Uhrzeigersinn (wichtig). Bei Ethan haben wir zwei verschiedene Konformere, das **gestaffelte** und das **verdeckte / ekliptische** Konformer. Das verdeckte ist energetisch ungünstiger, da die Hs sich gegenseitig abstoßen. Wir können jetzt für jeden Drehwinkel θ (oder Diederwinkel) eine Energie messen



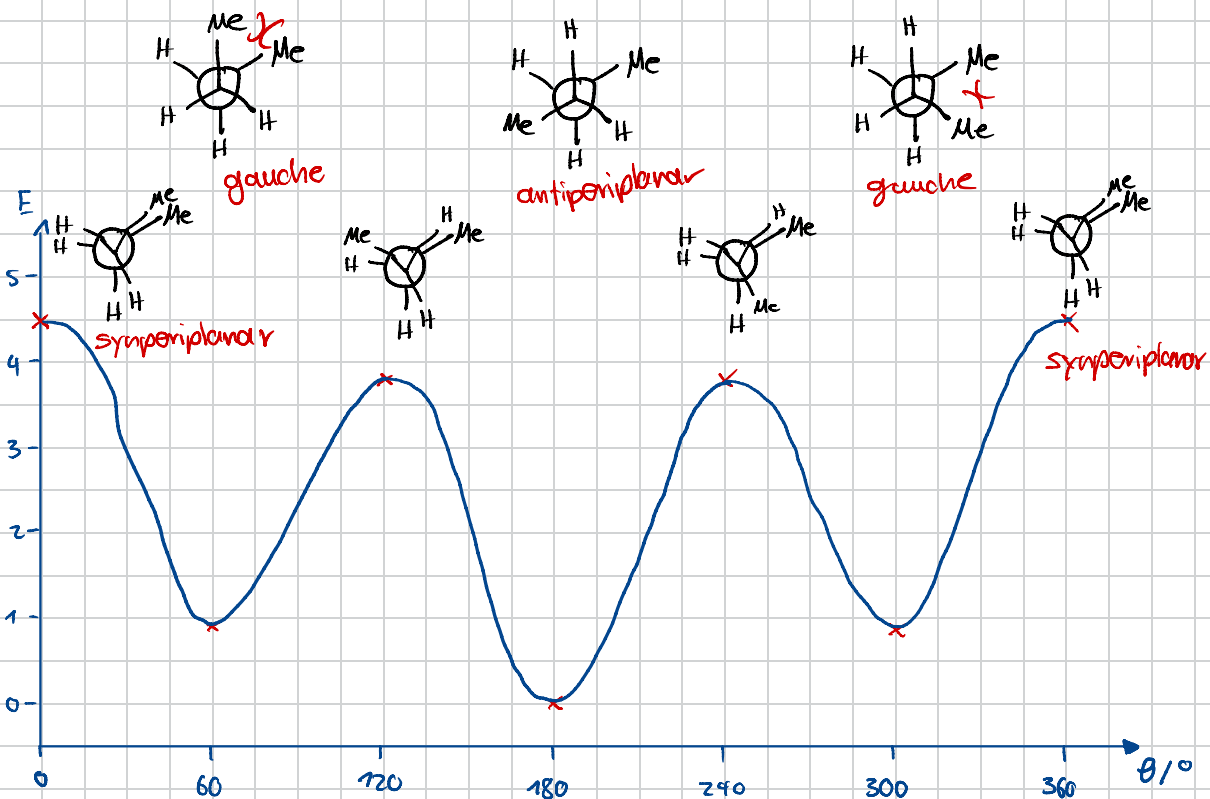
Energieunterschied verdeckte vs. gestaffelte Konformation 3 kcal/mol

$\Rightarrow$ Energie für verdeckte Hs 1 kcal/mol

Konformationsanalyse Butan

Wir wählen in ACOCI meistens unseren Energienullpunkt für Konformationsanalyse bei der gestaffelten Konformation von Ethan. Wenn wir jetzt ein grösseres Molekül wie Butan analysieren wird häufig gefordert die Newman-Projektion entlang der C(2)-C(3)-Bindung zu zeichnen, womit die Lokanten nach IUPAC-Nomenklatur gemeint ist.

gauche	Me/Me :	0.9	kcal/mol
verdeckte	H/H :	1.0	kcal/mol
verdeckte	Me/H :	1.9	kcal/mol
verdeckte	Me/Me :	2.5	kcal/mol



Energien bei offenkettiger Konformationsanalyse in ACOCI

- Wir nehmen, dass alle Energien vollkommen additiv sind.
 $\hookrightarrow$ Verdeckte Ethankonformation $3 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}} \Rightarrow 1 \text{ verdecktes H/H } 1 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$
- Alle Substituenten wie Me, Et, iPr usw. sind Punkte, deren Drehung interessiert uns nicht.
- Die vier Grundenergien sind immer gleich!
 - $\hookrightarrow$ *gauche* Me/Me : 0.9 kcal/mol
 - $\hookrightarrow$ verdeckte H/H : 1.0 kcal/mol
 - $\hookrightarrow$ verdeckte Me/H : 1.4 kcal/mol
 - $\hookrightarrow$ verdeckte Me/Me : 2.5 kcal/mol

Altprüfungsbeispiel

4.2 Konformationen offenkettiger Verbindungen (19 Punkte)

Es sind die Energien (relativ zu gestaffeltem Ethan) der folgenden Wechselwirkungen angegeben:

Wechselwirkung	<i>gauche</i> - CH ₃ /CH ₃	verdeckte H/H	verdeckte CH ₃ /H	verdeckte CH ₃ /CH ₃
Energie/ (kcal/mol)	0.9	1.0	1.4	2.5

Für die folgenden Verbindungen:

- Zeichnen Sie die Newman-Projektionen entlang der C(2)–C(3) Bindung für die Konformationen mit höchster und niedrigster Energie; (8 Punkte)
- Berechnen Sie diese Energien; (8 Punkte)
- Markieren Sie alle *gauche*-Wechselwirkungen in den Newman-Projektionen. (3 Punkte)

Verbindung	Konformation mit höchster Energie		Konformation mit niedrigster Energie	
	Newman-Projektion	Energie/ (kcal/mol)	Newman-Projektion	Energie/ (kcal/mol)
Butan		4.5		0
2-Methylbutan		4.9		0.9
2,2,3-Trimethylbutan		6.4		3.6
2,2,3,3-Tetramethylbutan		7.5		5.4