



# Stereochemie - 1

## Konformationsisomerie



# Rotationen um Einfachbindungen: Konformationen

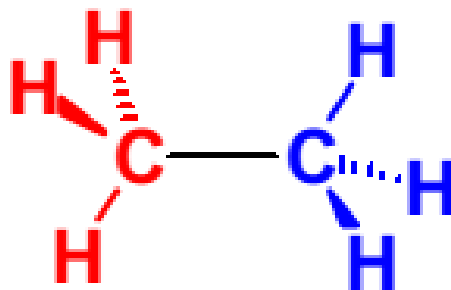
Bekanntlich sind die C-C-Einfachbindungen aus rotationssymmetrischen  $\sigma$ -Bindungen aufgebaut. Um derartige Bindungen sind Rotationen möglich, durch die an die Kohlenstoffe gebundene weitere Substituenten verschiedene Stellungen relativ zueinander einnehmen können.

**Atomanordnungen, die durch Drehung um Einfachbindungen ineinander überführt werden können, nennt man Konformationen.**

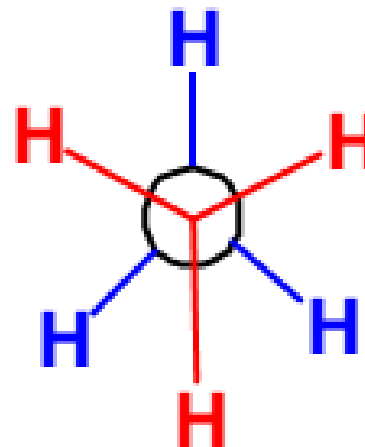
Energetische Betrachtungen zeigen, dass **nicht** alle Konformationen eines Moleküls die selbe potentielle Energie besitzen.

# Isomerie-Typen: strukturelle und räumliche Isomerie. Konformationsisomerie.

Zur Darstellung von Konformationen hat sich neben der **Keil-Strich-Projektion** besonders die **Newman-Projektion** bewährt.



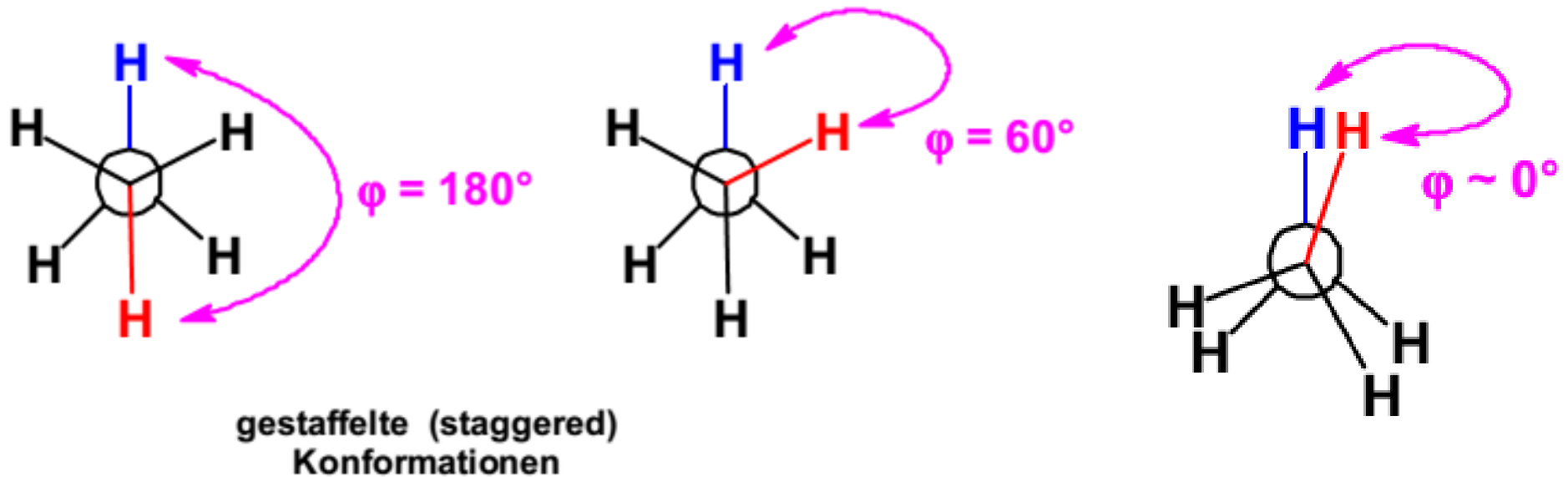
**Keil-Strich-Projektion**



**Newman-Projektion**

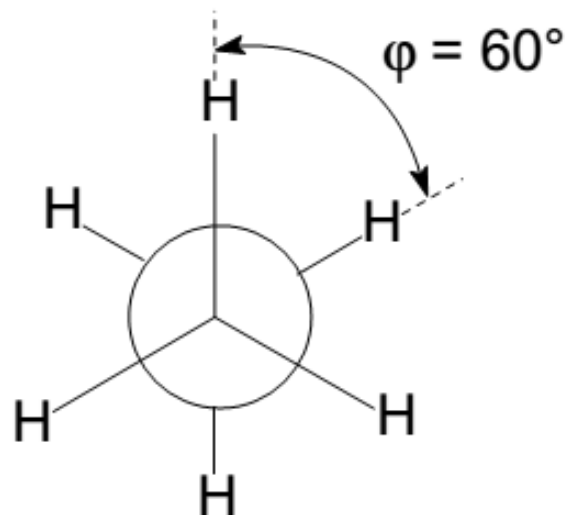
# Verdrehungswinkel (Torsionswinkel)

Beim Energie-Vergleich einzelner Konformationen ist besonders die **Newman**-Projektion und der Torsionswinkel  $\varphi$  hilfreich. Konformationen, bei denen die Substituenten "auf Lücke" stehen, werden **gestaffelt** (staggered) genannt. Konformationen, bei denen sich die Substituenten "verdecken", werden **ekliptisch** (eclipsed) genannt.

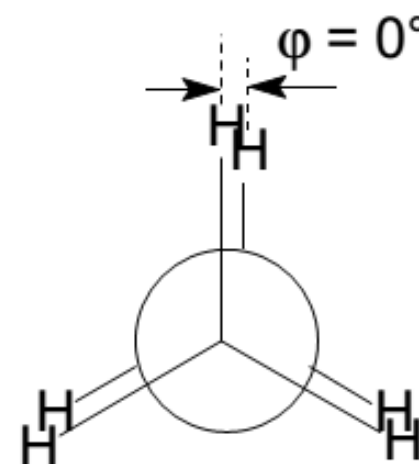


~ verdeckte (eclipsed) Konformation

# Bulgarisch:

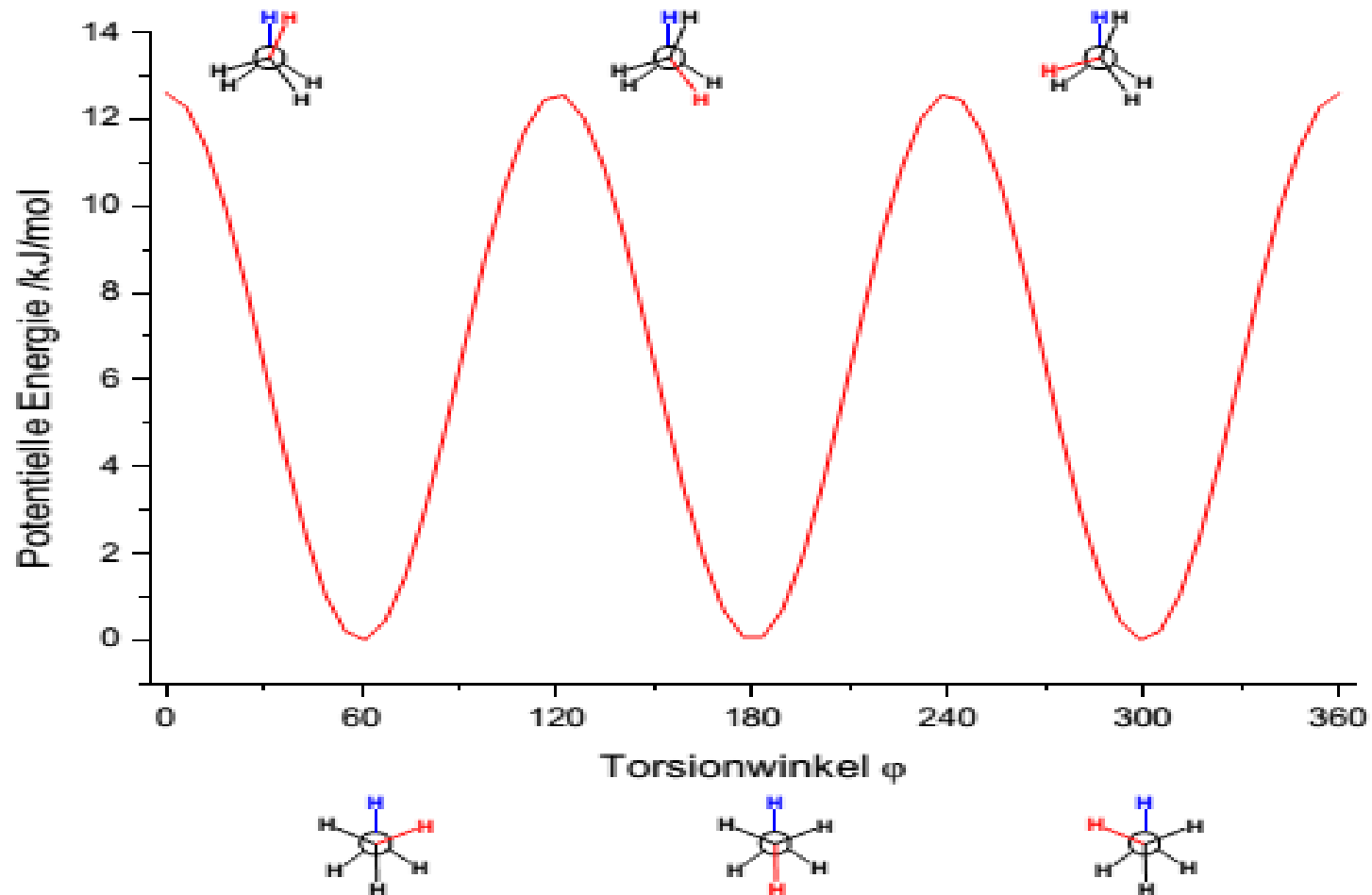


скосена  
конформация



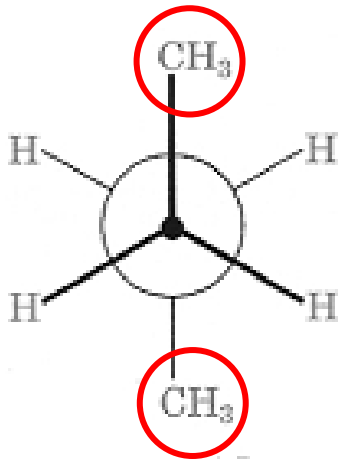
засенчена  
конформация

# Verlauf der potentiellen Energie als Funktion des Torsionswinkels $\varphi$ für Ethan:



# Konformationen des Butans

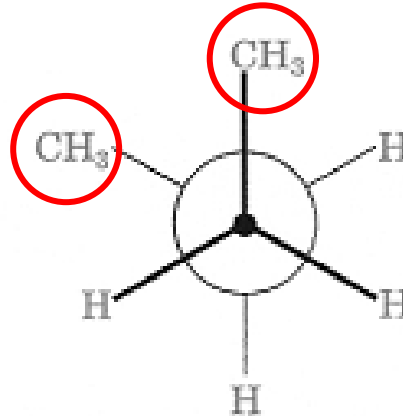
(um die C2—C3 Bindung)



**anti**

niedrigste  
Energie

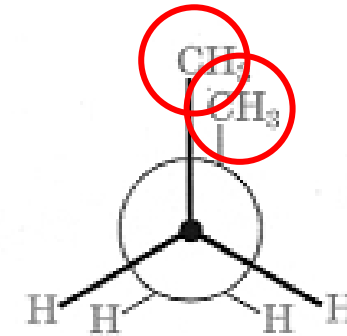
$$\varphi = 180^\circ$$



**gauche**

mittlere  
Energie

$$\varphi = 60^\circ$$

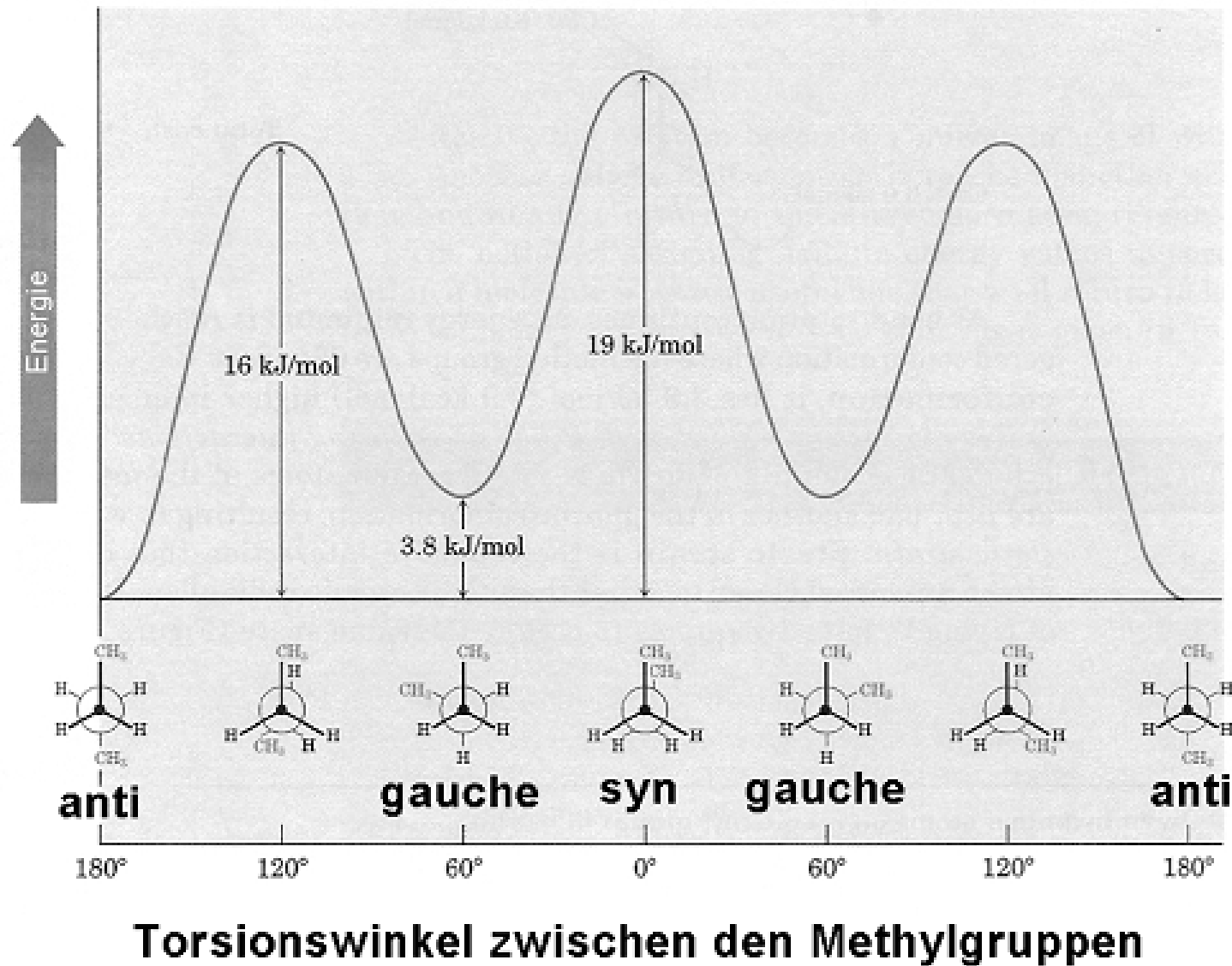


**syn**

ekliptisch:  
höchste Energie

$$\varphi = 0^\circ$$

## Zwei Energiemaxima im Butan.

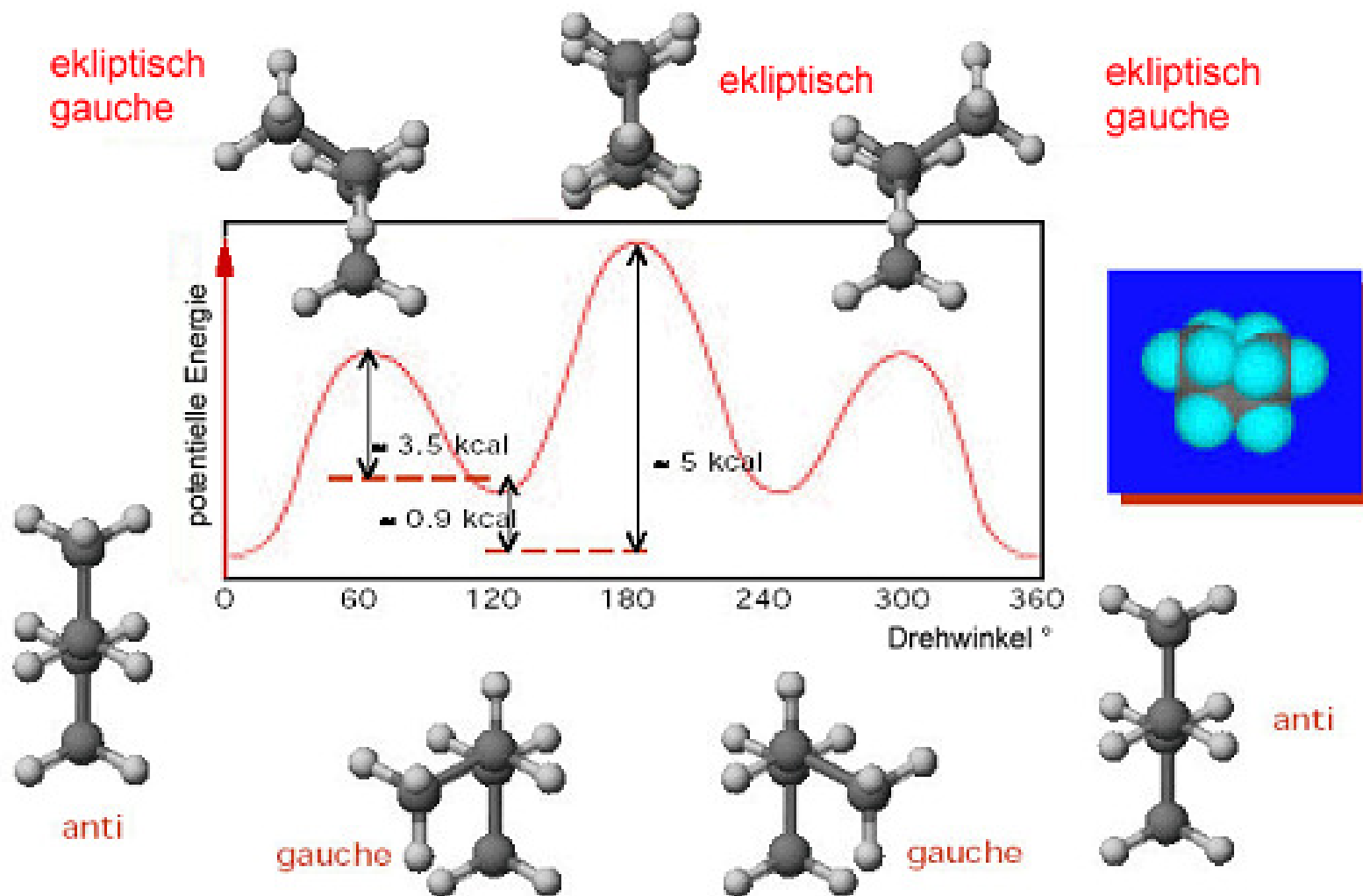




# Konformere

- Konformationen, denen Energieminima zuzuordnen sind, werden **Konformere** genannt. Zur Überführung eines **gestaffelten** Konformers (z.B.  $\varphi = 60^\circ$ ) in ein anderes (z.B.  $\varphi = 120^\circ$ ) muss **im Fall des Ethans** eine Energiebarriere von 12,6 kJ/mol überwunden werden.
- Die Konformere **des Butans** mit unterschiedlichen Energiegehalten werden als **gauche** und **anti(-periplanar)** bezeichnet. Der Torsionswinkel beträgt  $\varphi = 60^\circ$  (**gauche**) oder beziehungsweise  $\varphi = 180^\circ$  [**anti(-periplanar)**]. Die **ekliptische Konformation**, bei der die beiden Methylgruppen "hintereinander" liegen ( $\varphi = 0^\circ$ ) ist energiereicher als die beiden anderen ekliptischen Konformationen und wird **syn(-periplanar)** genannt und ist **kein Konformer**.

# Konformationen des Butans (Kugel-Stab-Modelle)

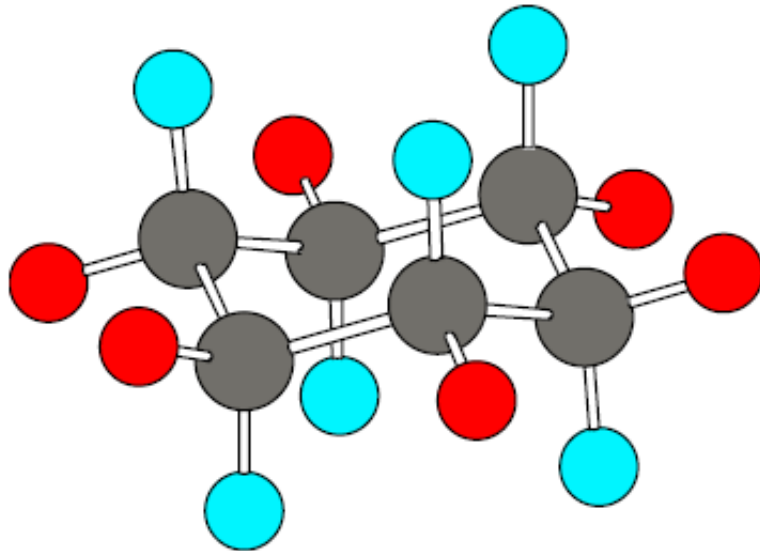




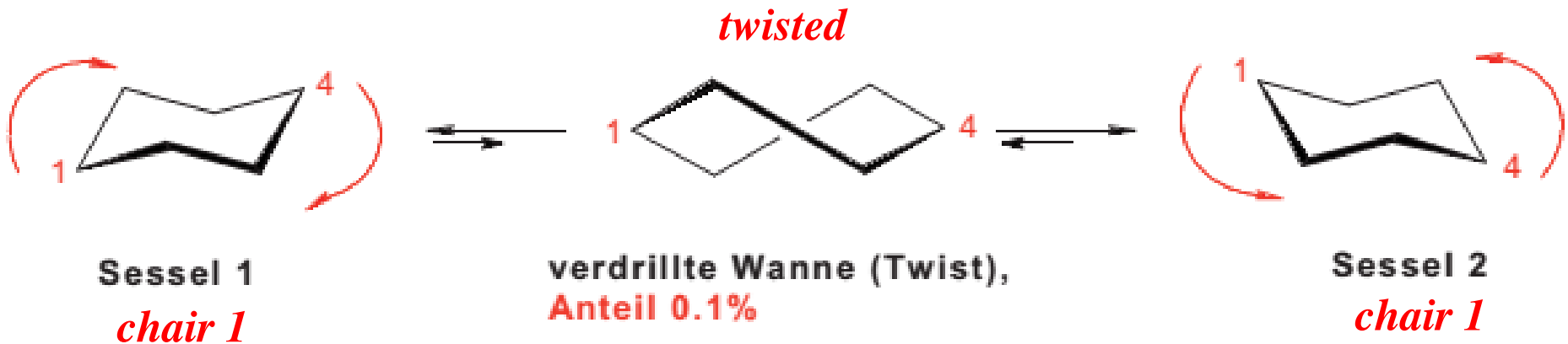
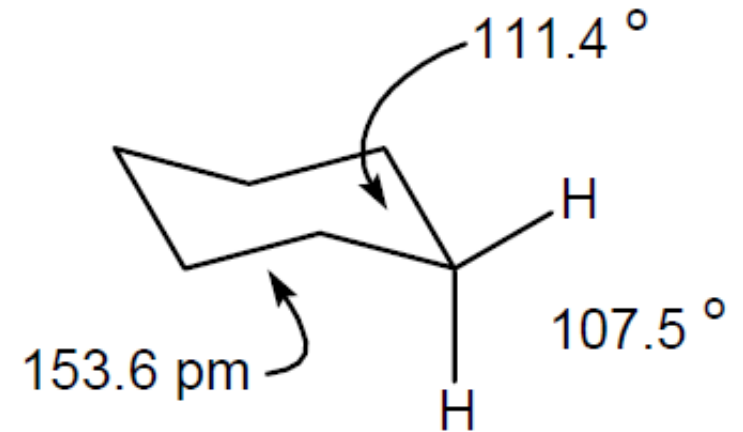
# Konfigurationsisomere

- **Konformationsisomere:** Isomere welche die gleiche Konnektivität aufweisen, aber eine unterschiedliche räumliche Position besitzen. Sie lassen sich durch Rotation um Bindungsachsen ineinander überführen.
- **Chemienobelpreis 1969:** Derek Harold Richard Barton, Odd Hassel – der Brite Barton und der Norweger Hassel erhielten den Nobelpreis für die Entwicklung des Konformationsbegriffs und dessen Anwendung in der Chemie (***Konformationsanalyse***).

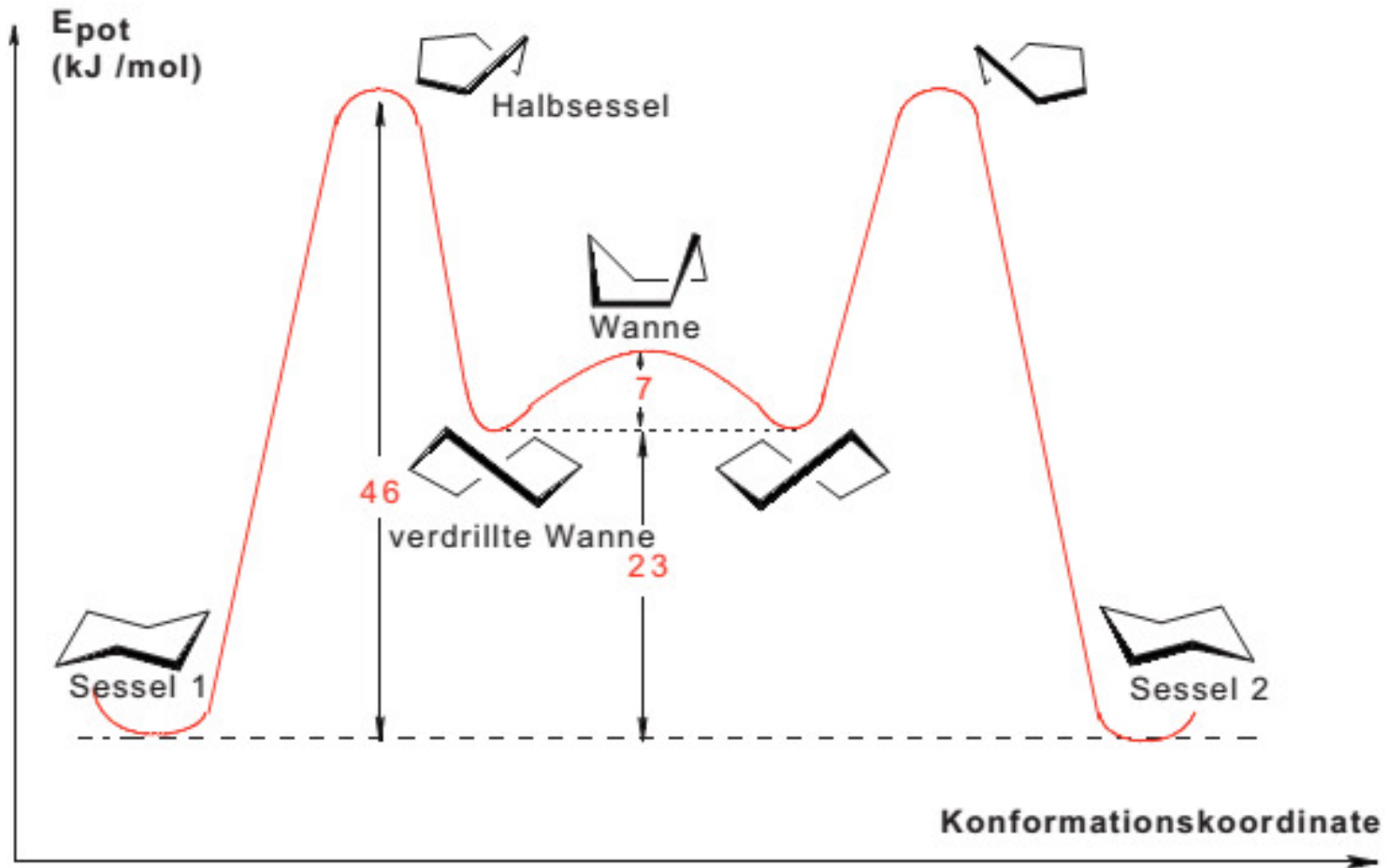
# Konformationen des Cyclohexans



rot = equatoriale Positionen bzw. Reste  
blau = axiale Positionen bzw. Reste

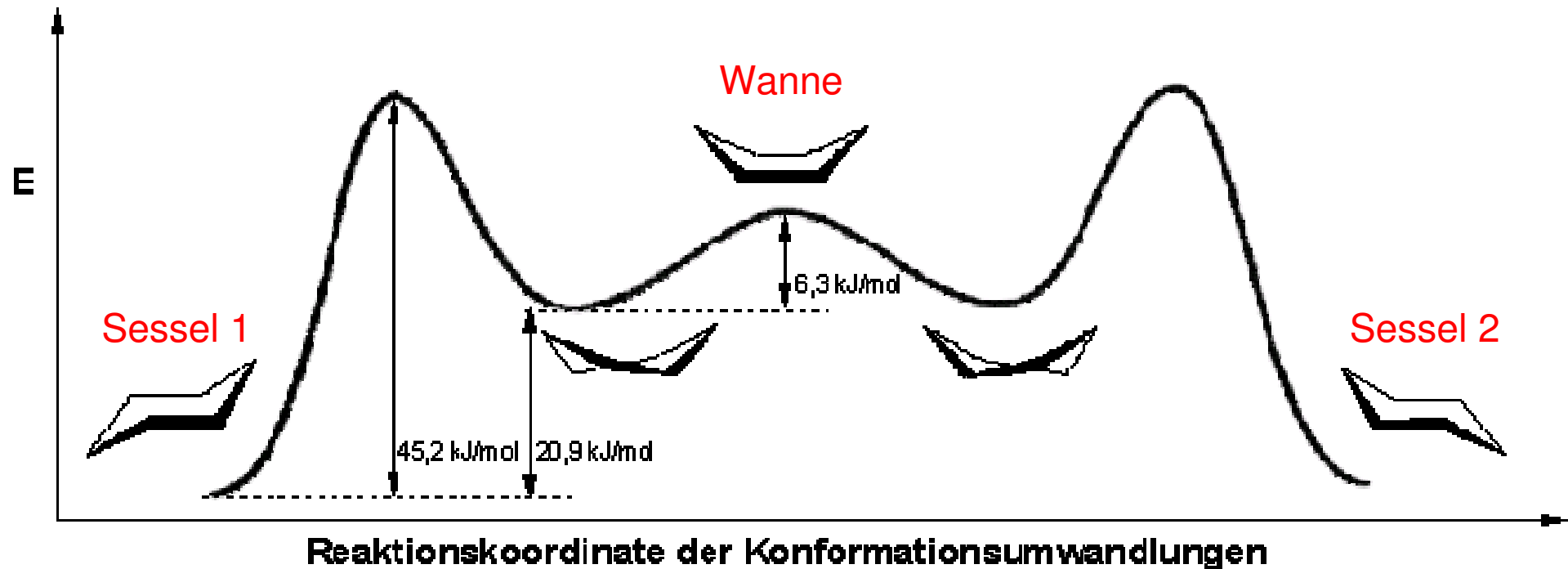


# Energiediagramm (1)



Energieprofil: Umwandlung der Konformeren von Cyclohexan

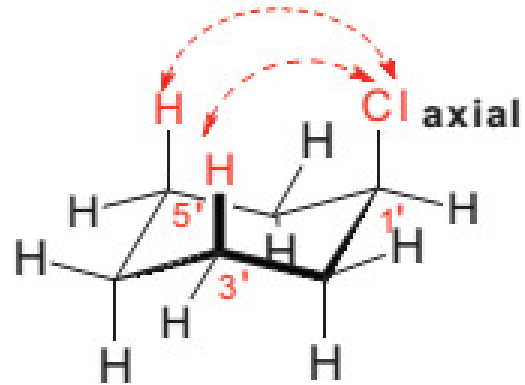
# Energiediagramm (2)



**Halbsessel und Wanne stellen Übergangszustände dar !**

# Konformation substituierter Cyclohexanverbindungen

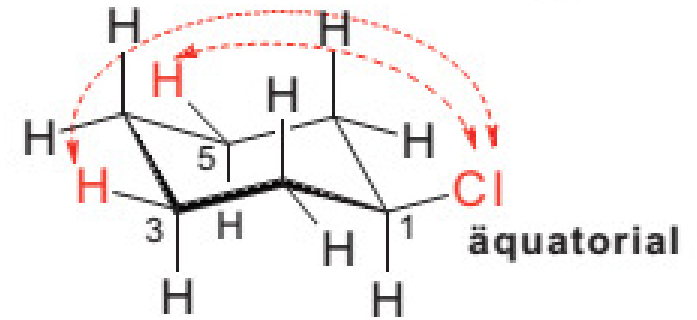
Abstoßung



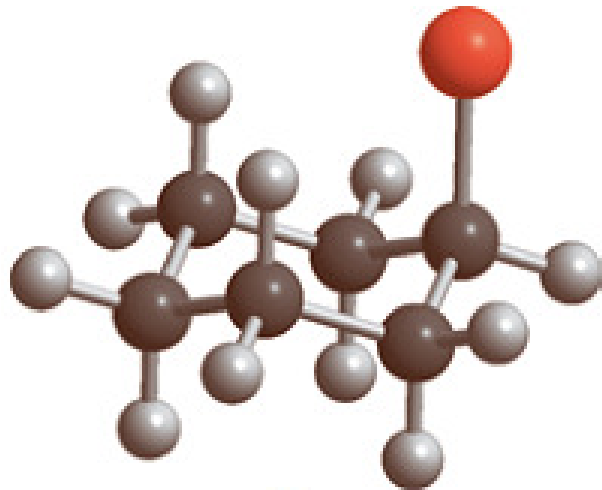
I 20 %



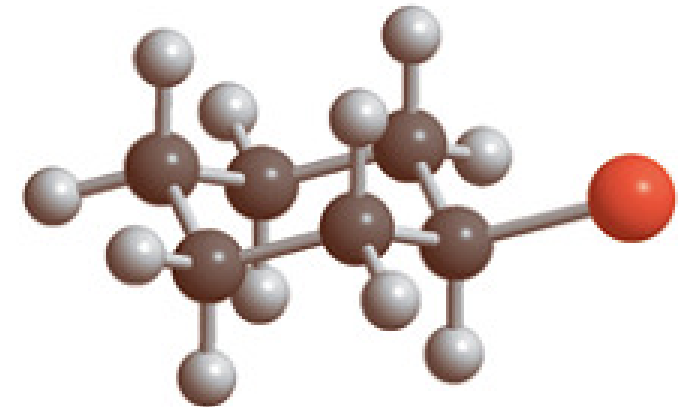
keine Abstoßung



II 80 %



*Sessel 1*



*Sessel 2*



# Aufgaben:

- 1. Warum besitzt die Sesselkonformation von allen denkbaren Cyclohexankonformationen die geringste potentielle Energie?
- 2. *cis*- und *trans*-Dimethylcyclohexan treten jeweils in zwei stabilen Konformeren auf. Schätzen Sie das Konformerenverhältnis bei der *cis*- und der *trans*-Verbindung.