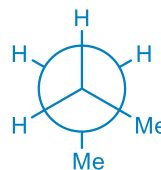
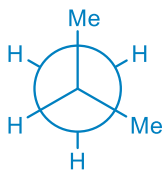


## 10 Konformationen offenkettiger Moleküle

1. Markieren Sie die einzige richtige Antwort.

(a) Die folgenden Strukturen sind:



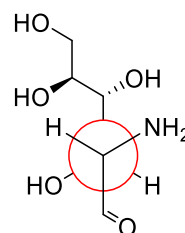
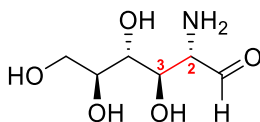
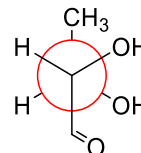
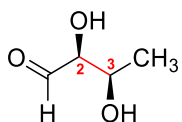
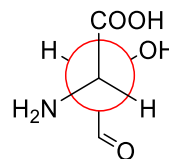
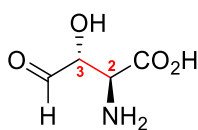
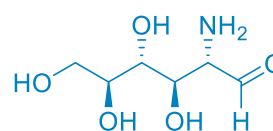
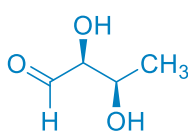
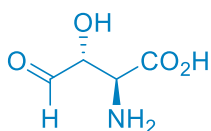
- A. keine Isomere
- B. *cis*- und *trans*-Isomere
- C. Konformationsisomere
- D. Konstitutionsisomere (richtig)
- E. sowohl C als auch D

(b) Unter allen Konformationen eines *n*-Butanmoleküls, welche befinden sich in einem Energieminimum?

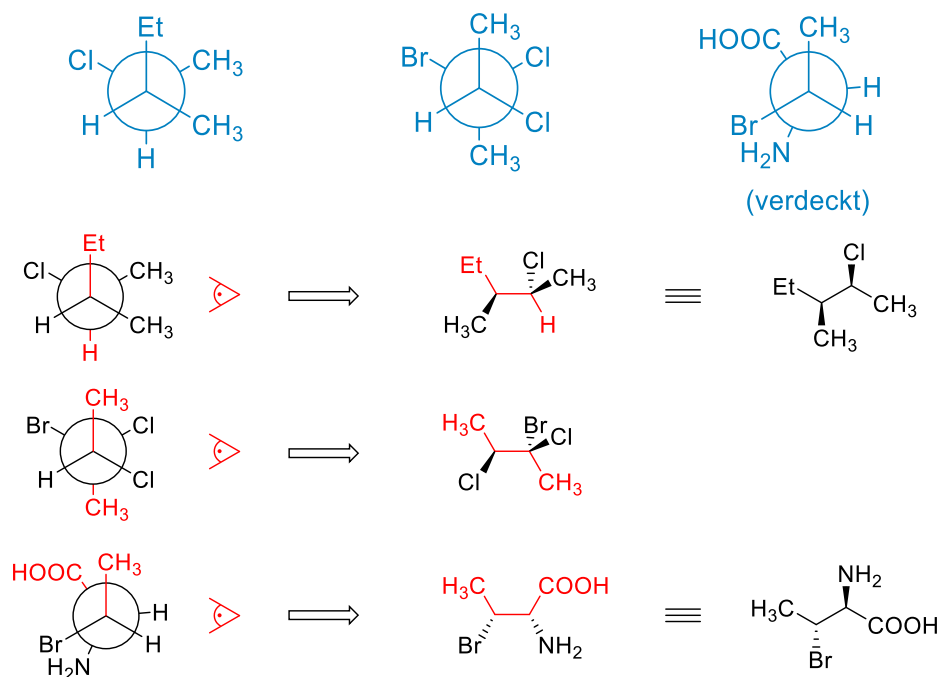
- A. nur *gauche*
- B. verdeckt und synperiplanar
- C. *gauche* und antiperiplanar (richtig)
- D. nur verdeckt (nicht synperiplanar)
- E. nur antiperiplanar

2. Newman-Projektion vs. Keilstrich-Schreibweise:

(a) Zeichnen Sie die folgenden Moleküle in der Newman-Projektion entlang C(2)–C(3)-Bindungen.



(b) Zeichnen Sie die folgenden Moleküle in der Keilstrich-Schreibweise.

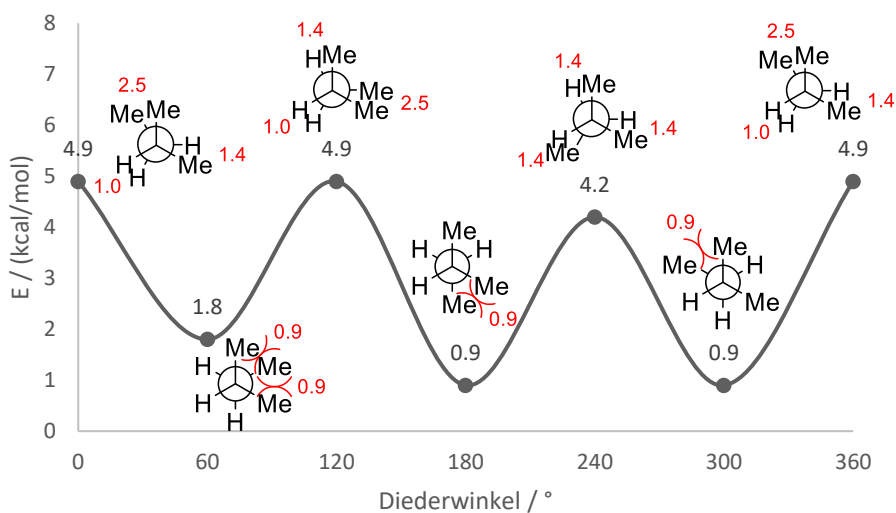


3. Für den Kohlenwasserstoff 2-Methylbutan:

- (a) Geben Sie das Diagramm der potentiellen Energie für die Rotation um die C(2)–C(3)-Bindung an.
- (b) Zeichnen Sie die den Minima (Konformere) und Maxima (Übergangszustände) entsprechenden Newman-Projektionen.

Die Zahl der verdeckten (ekliptischen) H/H, CH<sub>3</sub>/H, CH<sub>3</sub>/CH<sub>3</sub>, sowie der *gauche*-Wechselwirkungen bestimmt die relative Energie der einzelnen Konformationen (Minima und Maxima im Energiediagramm). Die Spannungen betragen:

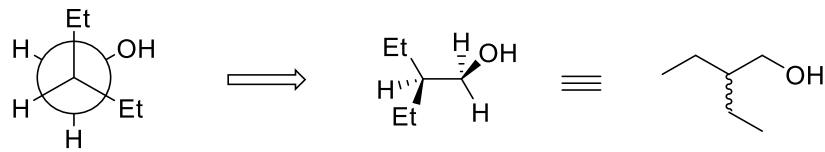
- verdeckte H/H: 1.0 kcal/mol
- verdeckte CH<sub>3</sub>/H: 1.4 kcal/mol
- verdeckte CH<sub>3</sub>/CH<sub>3</sub>: 2.5 kcal/mol
- gestaffelte *gauche*-CH<sub>3</sub>/CH<sub>3</sub>: 0.9 kcal/mol



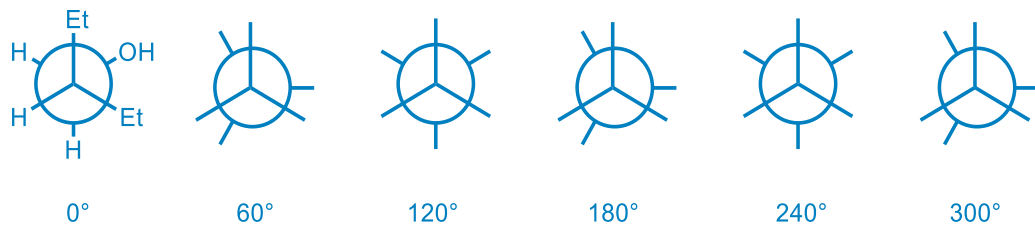
4. Für das untenstehende Molekül:

(a) Zeichnen Sie das Molekül in der Keilstrich-Schreibweise und benennen Sie es.

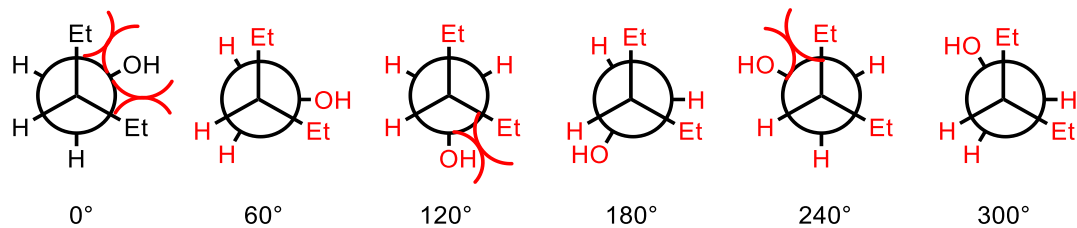
Das Molekül ist 2-Ethylbutanol:



(b) Zeichnen Sie die Newman-Projektionen für alle gestaffelten und ekliptischen Konformationen, indem Sie die hintere Gruppe im Uhrzeigersinn rotieren. Starten Sie bei  $0^\circ$  (bereits eingezeichnet).

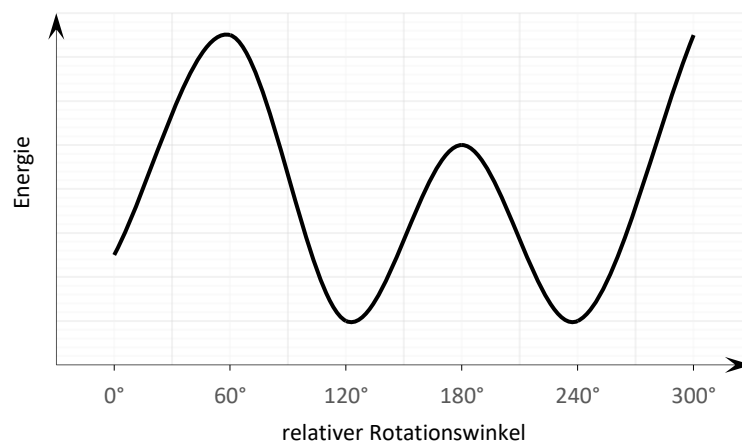


(c) Zeichnen Sie die *gauche*-Wechselwirkungen für alle gestaffelten Konformationen ein.



Bemerkung: Bei den angezeigten Winkeln in dieser Aufgabe handelt es sich um relative Rotationswinkel und nicht um Diederwinkel im üblichen Sinne. Wenn wir hier die Diederwinkel bestimmen wollen, dann sollte  $0^\circ$  einer der verdeckten Konformationen entsprechen (normalerweise die mit der höchsten Energie).

(d) Zeichnen Sie das Energiediagramm (qualitativ) für die Rotation um diese Bindung.

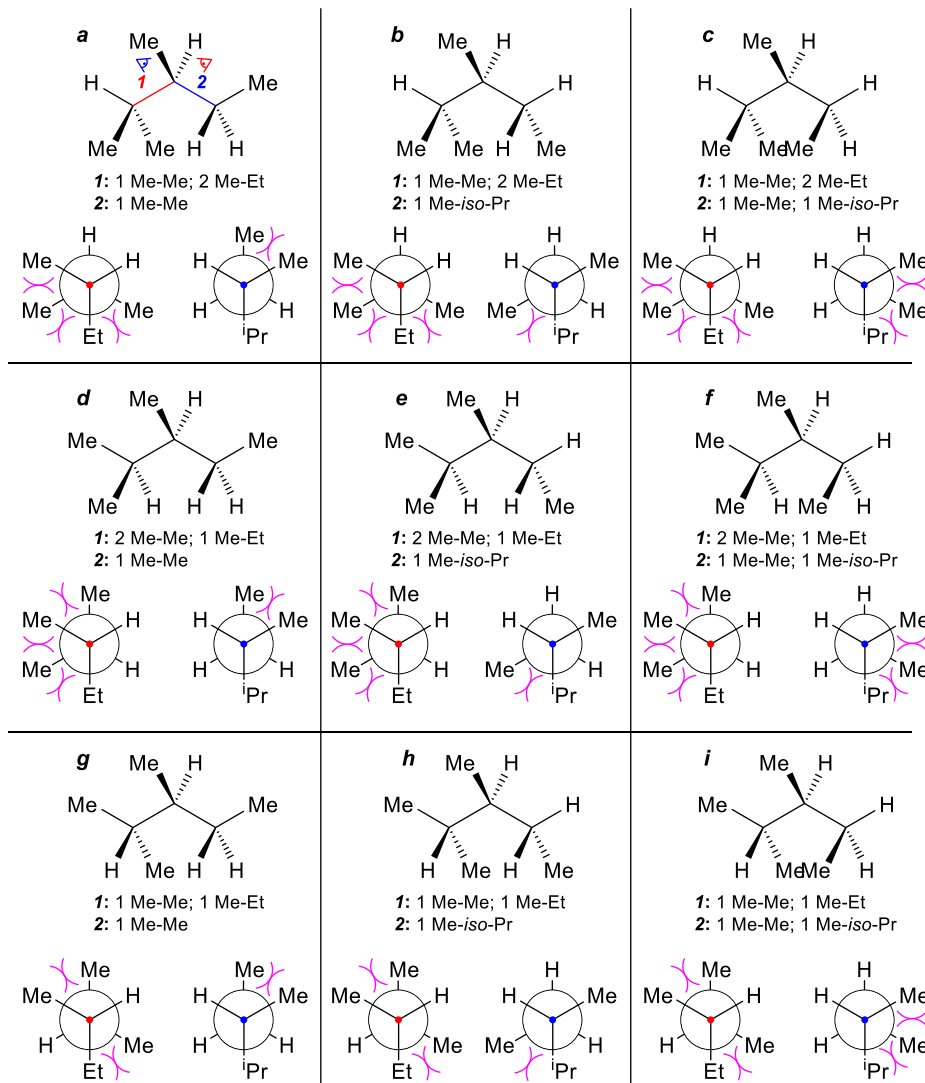


5. Für (S)-2,3-Dimethylpentan:

(a) Zeichnen Sie alle Konformere (Energiminima) in der Keilstrich-Schreibweise. Betrachten Sie dazu die Rotation um die C(2)-C(3)- und C(3)-C(4)-Bindungen, sodass Sie 9 Konformere bekommen.

(b) Geben Sie aufgrund der auftretenden *gauche*-Wechselwirkungen an (zeichnen hierfür die Newman-Projektionen, um die WW einfacher zu zählen), welche davon den höchsten bzw. den niedrigsten Energieinhalt haben.

Konformer niedrigster Energie: **g**; Konformer höchster Energie: **c**. Bitte beachten Sie, dass es sich bei der hier angestellten energetischen Analyse nur um eine Näherung handelt: die in Reihe 3 (**g**, **h**, **i**) angegebenen Me/Et-*gauche*-WW sind bspw. nicht identisch! (Welche Me/Et-*gauche*-WW schätzen Sie am höchsten ein? Die Antwort ist die WW in **h**, weil die Me-Gruppen hinter der Papierebene genau ekliptisch sind.)



(c) Gibt es Konformations-Enantiomere, d.h. Enantiomere, die sich durch Drehung um Einfachbindungen ineinander überführen lassen?

Da die angegebene Verbindung chiral ist (Konfiguration!), können durch Rotation um Einfachbindungen keine Konformations-Enantiomere auftreten.

(d) Wie würde ein Energiediagramm aussehen (prinzipielle Beschreibung in Worten), das alle Konformere enthält?

In einem vollständigen Energiediagramm aller Konformationen würde man in zwei Dimensionen die Torsionswinkel um Bindung 1 und 2, und in der dritten Dimension, die der entsprechenden Konformation zugehörige Energie auftragen, was eine Art Hügellandschaft ergibt.