

Piotr Chojnacki
IV rok informatyki chemicznej
piątek, godz. 11⁰⁰

Wrocław dnia 10 marca 2006 roku

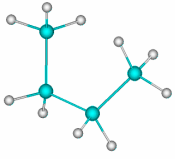
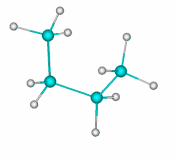
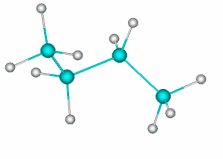
Przedmiot specjalizacyjny II

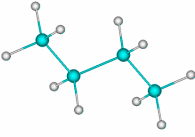
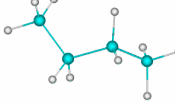
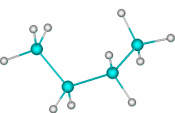
**Analiza konformacyjna
butanu i cykloheksanu.**

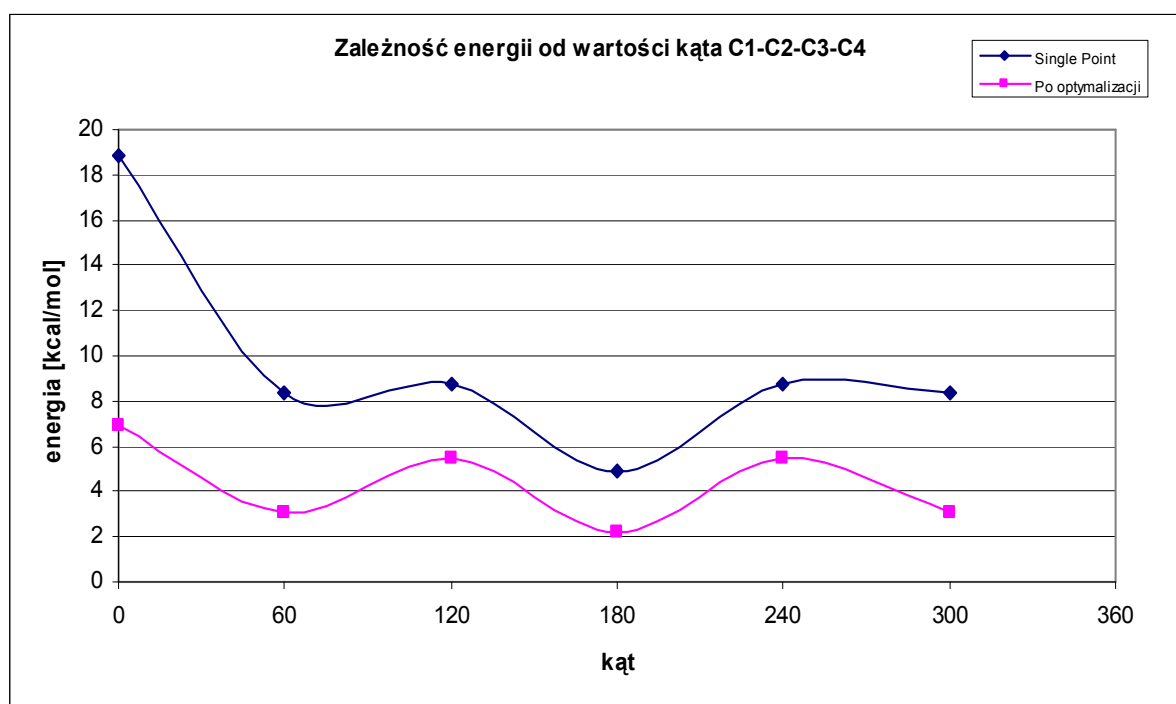
Analiza konformacyjna butanu

Otrzymane wartości:

Początkowa wartość kąta C1-C2-C3-C4	Energia "Single Point" [kcal/mol]	Kąt C1-C2-C3-C4 po optymalizacji	Energia po optymalizacji [kcal/mol]
0	18,82278	-0,000450212	6,900747
60	8,332545	64,0419	3,037376
120	8,729486	118,997	5,527787
180	4,947542	180	2,17193
240	8,729551	-118,998	5,52779
300	8,332665	-64,0423	3,037374

Początkowa wartość kąta C1-C2-C3-C4	Rysunek struktury	Względna energia [kcal/mol]
0		4,728817
60		0,865446
120		3,355857

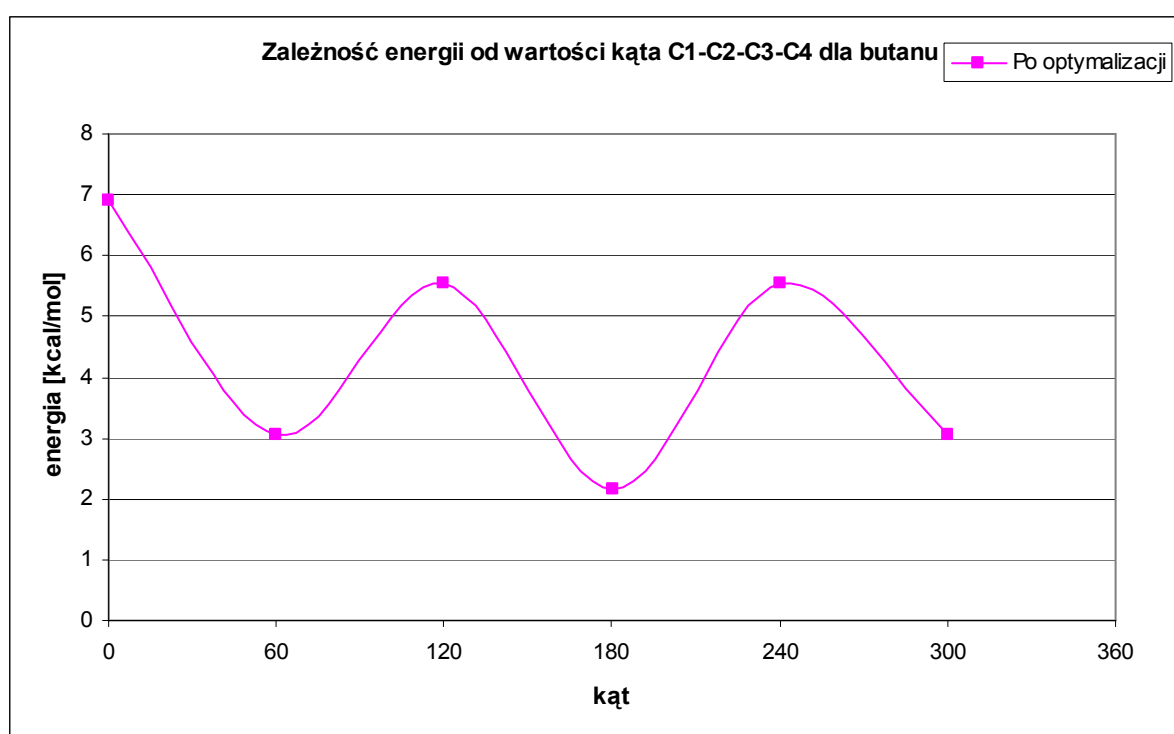
Początkowa wartość kąta C1-C2-C3-C4	Rysunek struktury	Względna energia [kcal/mol]
180		0
240		3,35586
300		0,865444



Które konformery odpowiadają minimum, a które maksimum na powierzchni energii potencjalnej? Wyjaśnij, jakie są tego przyczyny.

Minimum odpowiada konformer posiadający kąt pomiędzy atomami C1-C2-C3-C4 równy 180° . Najbardziej stabilną konformacją jest układ, kiedy grupy metylowe są maksymalnie od siebie oddalone.

Maksimum odpowiada konformer, który posiada kąt pomiędzy atomami C1-C2-C3-C4 równy 0° . Najmniej trwałą konformacją jest układ, kiedy grupy metylowe są blisko siebie.



Na wykresie ołówkiem naszkicowana została podobna oczekiwana zależność dla 2-metylobutanu.

Różnica pomiędzy wykresami wynika z tego, iż jeden wodór przy węglu C2 został zastąpiony grupą metylową, która jest znacznie większa od atomu wodoru i tworzy większą zawadę steryczną, przez co utrudniony jest obrót podstawników względem wiązania C2-C3.

Dlatego też dla 2-metylobutanu mamy wyższe wartości energii, minima energetyczne posiada przy kącie torsyjnym równym 180° i 300° , a maksima energetyczne przy kącie torsyjnym 0 i 120° .

Analiza konformacyjna cykloheksanu

Konformer	Długość wiązania C1-C2	Kąt C1-C2-C3	Kąt C1-C2-C3-C4	Odległość H17-H11
1	1,54	109,471	60	4,1224
1 (po optymalizacji)	1,53099	110,247	58,0356	4,13163
2	1,53094	110,246	-58,0372	3,53034
2 (po optymalizacji)	1,536	112,481	-53,0372	3,77111
3	1,54129	109,629	-37,1165	2,20149
3 (po optymalizacji)	1,53505	112,089	-33,3237	2,45206

Porównać odległość H17-H11 dla układów przed i po optymalizacji. Przedyskutować zachodzące zmiany. Czy są one zgodne z oczekiwaniami? Wyjaśnić dlaczego.

Z powodu tego, iż wodór H17 jest położony aksjalnie, zaś wodór H11, ekwatorialnie odległość dla konformacji 1 – krzeselkowej jest największa.

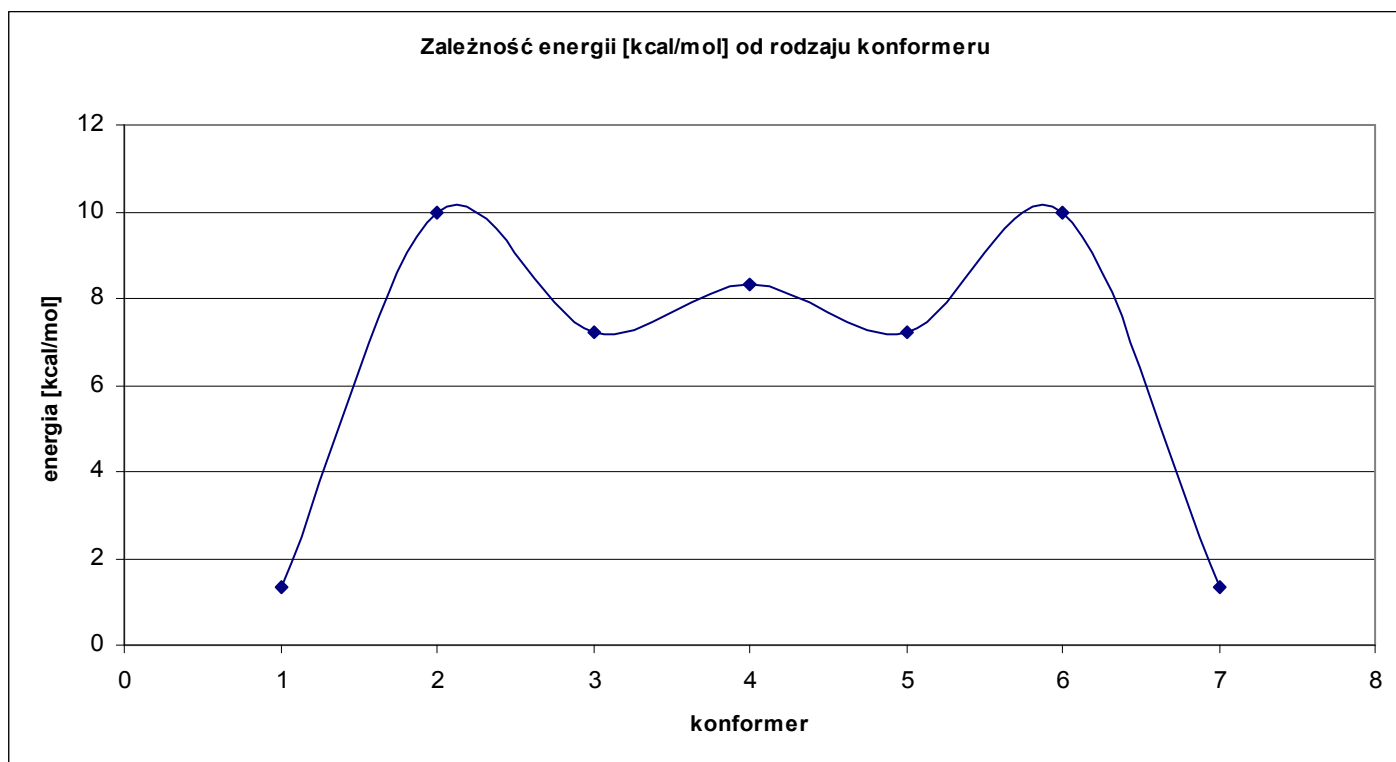
Zmiana struktury na łódkową czy zdeformowaną łódkową powoduje zmiany w położeniach atomów, co przedstawia powyższa tabelka. Zmiany te nie są korzystne, gdyż konformacje te są mniej trwałe.

Konformer	Energia [kcal/mol]	Energia względna [kcal/mol]
1	1,641718	0,308428
1 (po optymalizacji)	1,33329	0
2	156,181656	154,848366
2 (po optymalizacji)	8,3129	6,97961
3	11,9515	10,61821
3 (po optymalizacji)	7,218781	5,885491

Czy otrzymane wartości są zgodne z oczekiwaniami? Wyjaśnić dlaczego.

Pod względem energetycznym konformacja krzeselkowa jest najkorzystniejsza. Ponieważ atomy wodoru przyjmują położenie naprzemianległe.

W innych konformerach, pojawiają się oddziaływania naprzeciwległe pomiędzy atomami wodoru, powodując wzrost energii danego układu, przy czym struktura zdeformowanej łódki jest korzystniejsza pod względem energetycznym od konformacji łódkowej.



1,7 - konformacja krzesłowa

2,6 - konformacja przejściowa

3,5 - konformacja łódkowa zdeformowana

4 - konformacja łódkowa