

KONFORMACIONA

ANALIZA

II DEO: CIKLIČNI MOLEKULI

NAPOMENE:

1. AKTIVNI 3D MODELI NISU PRIKAZANI UNIFORMNO (RAZLIKUJU SE PO TOME KAKO SU PRIKAZANI

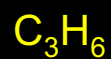
POJEDINI ATOMI I/ILI VEZE)

2. SVE "FOTOGRAFIJE" 3D MODELA GENERISANE SU IZ AKTIVNIH 3D MODELA I STOGA TAKOĐE NISU

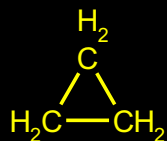
PRIKAZANE UNIFORMNO

3. PRIMENA BOJA NIJE UNIFORMNA

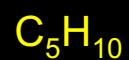
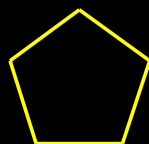
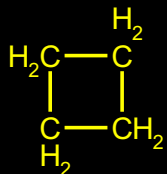
CIKLOALKANI : - OSNOVNI MONOCIKLIČNI SISTEMI SA 3 - 12 C ATOMA U PRSTENU



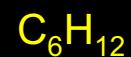
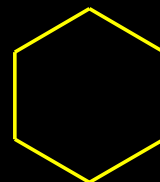
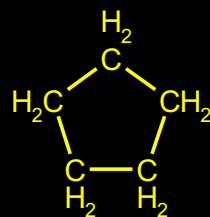
CIKLO-
PROPAN



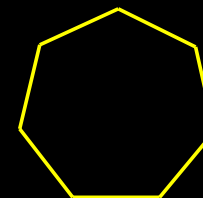
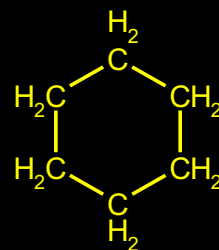
CIKLO-
BUTAN



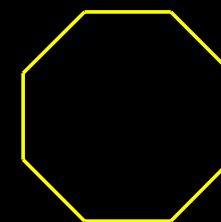
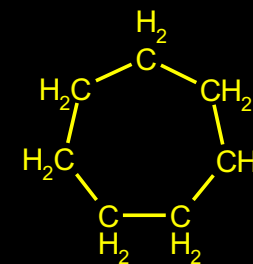
CIKLO-
PENTAN



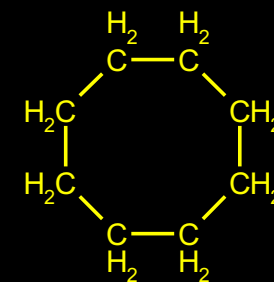
CIKLO-
HEKSAN



CIKLO-
HEPTAN

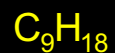
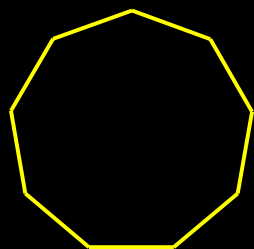


CIKLO-
OKTAN

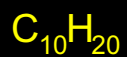
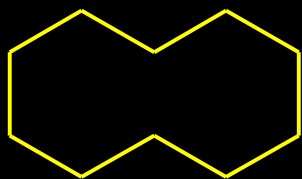


-CIKLOALKANI : STRUKTURA, KONFORMACIJA I KONFIGURACIJA

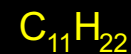
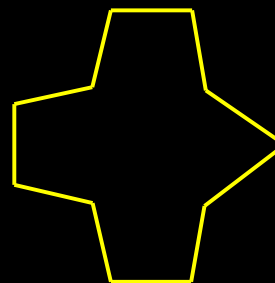
- OSNOVNI MONOCIKLIČNI SISTEMI SA 3 - 12 C ATOMA U PRSTENU



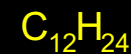
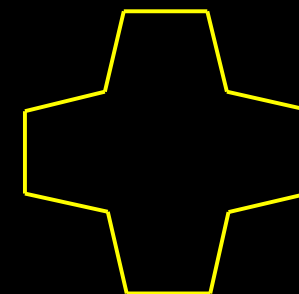
CIKLONONAN



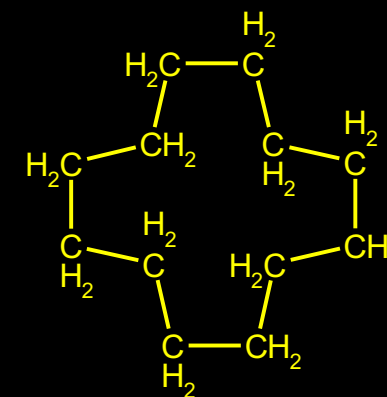
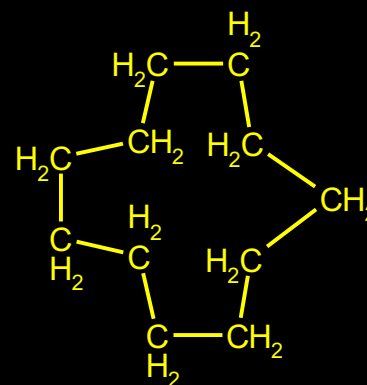
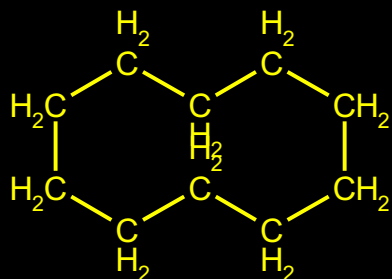
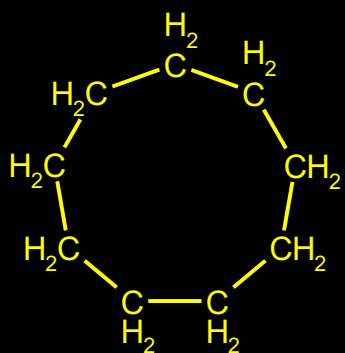
CIKLODEKAN



CIKLOUNDEKAN



CIKLODODEKAN



REALNI IZGLED MOLEKULA CIKLOALKANA U PROSTORU (3D) - KONFORMACIJA PRSTENOVA



SLIČNO KAO I KOD ALKANA OTVORENOG NIZA, I KOD CIKLIČNIH ALKANA MOGUĆA JE ROTACIJA OKO JEDNOSTRUKIH C-C (σ) VEZA, ALI JE BROJ STEPENA SLOBODE MANJI.

MOLEKUL CIKLOALKANA MOŽE ZAUZETI NEOGRANIČEN BROJ OBLIKA (KONFORMERA) U PROSTORU KOJI KONTINUALNO PRELAZE JEDAN U DRUGI ROTACIJOM OKO σ C-C VEZA.

-POJEDINI OBLICI (KONFORMERI) ISTOG MOLEKULA MANJE SU ENERGETSKI STABILNI OD DRUGIH (IMAJU VIŠI SADRŽAJ ENERGIJE).

- STOGA POSMATRANI MOLEKUL PROVODI KRAĆE VREME U KONFORMERIMA KOJI IMAJU VIŠI SADRŽAJ ENERGIJE, A DUŽE VREME U KONFORMERNIM OBLICIMA KOJI IMAJU NIŽI SADRŽAJ ENERGIJE.

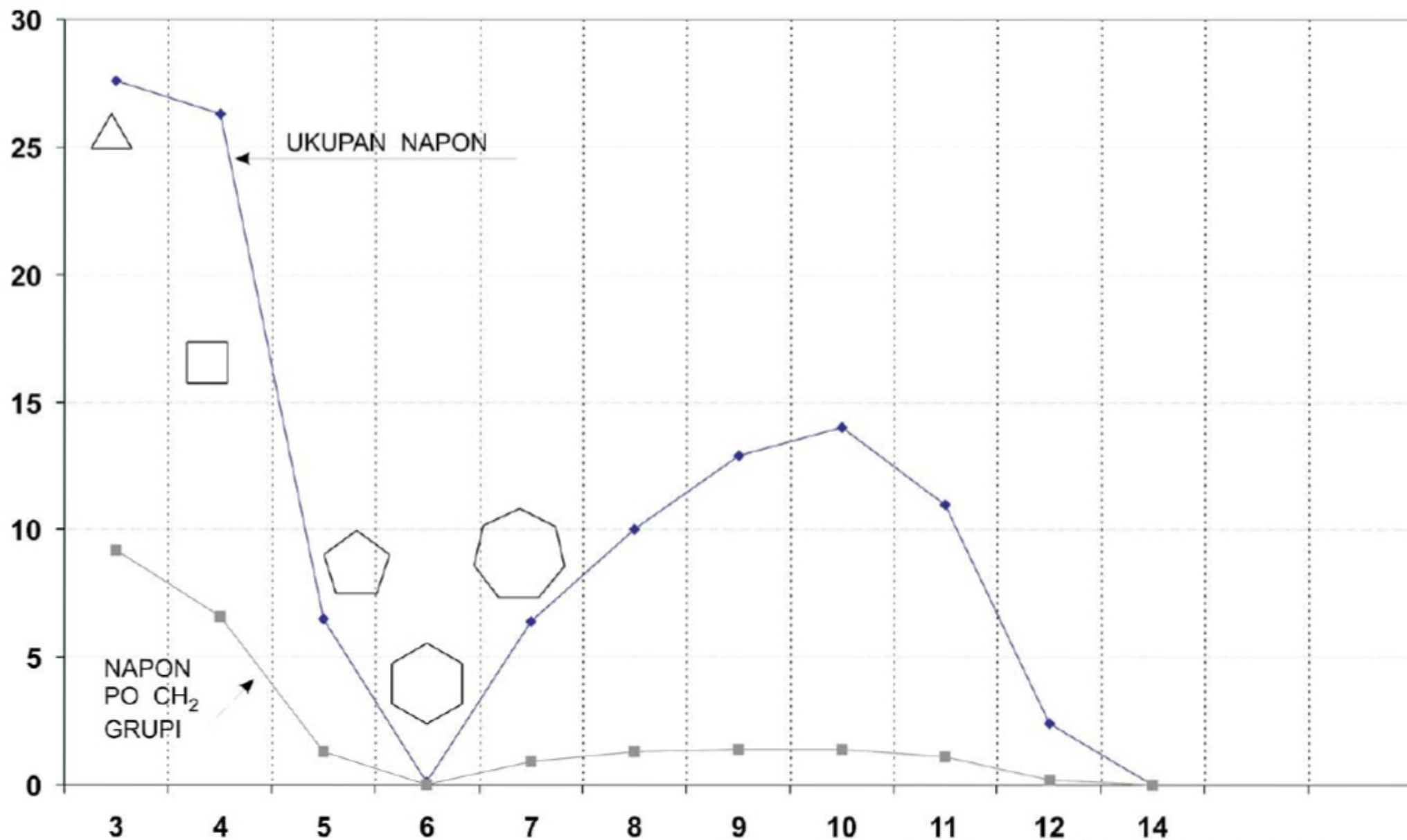
-PRI TOME, NIKADA NE DOLAZI DO RASKIDANJA BILO KOJE HEMIJSKE VEZE U MOLEKULU, VEĆ ISKLJUČIVO DO ROTACIJE OKO NJIH.

-RASKIDANJE I/ILI POSTAJANJE HEMIJSKE VEZE PREDSTAVLJA HEMIJSKU TRANSFORMACIJU (REAKCIJU) ALI PRI PROMENI KONFORMACIJE POSMATRANOG MOLEKULA DO TOGA NE DOLAZI

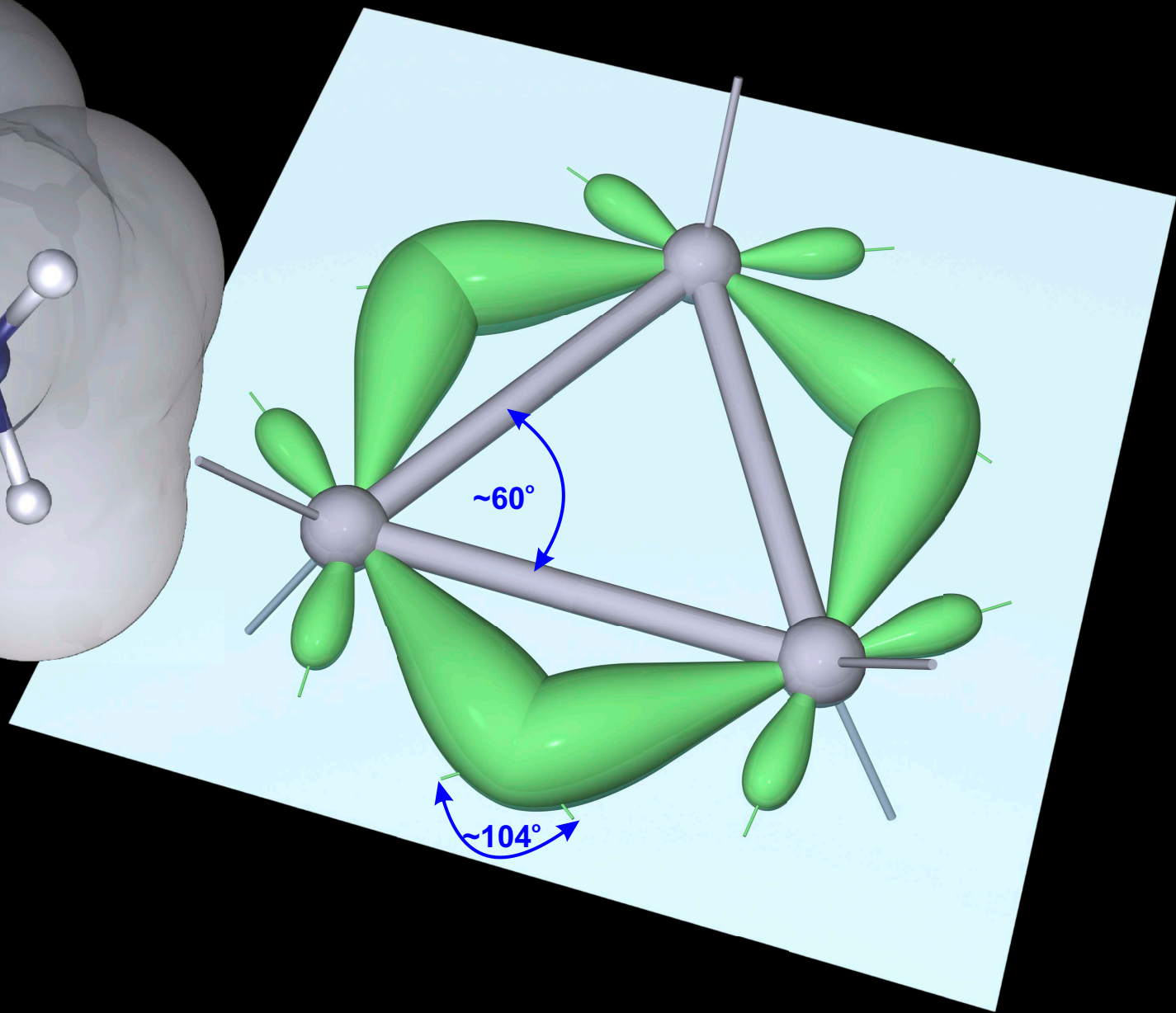
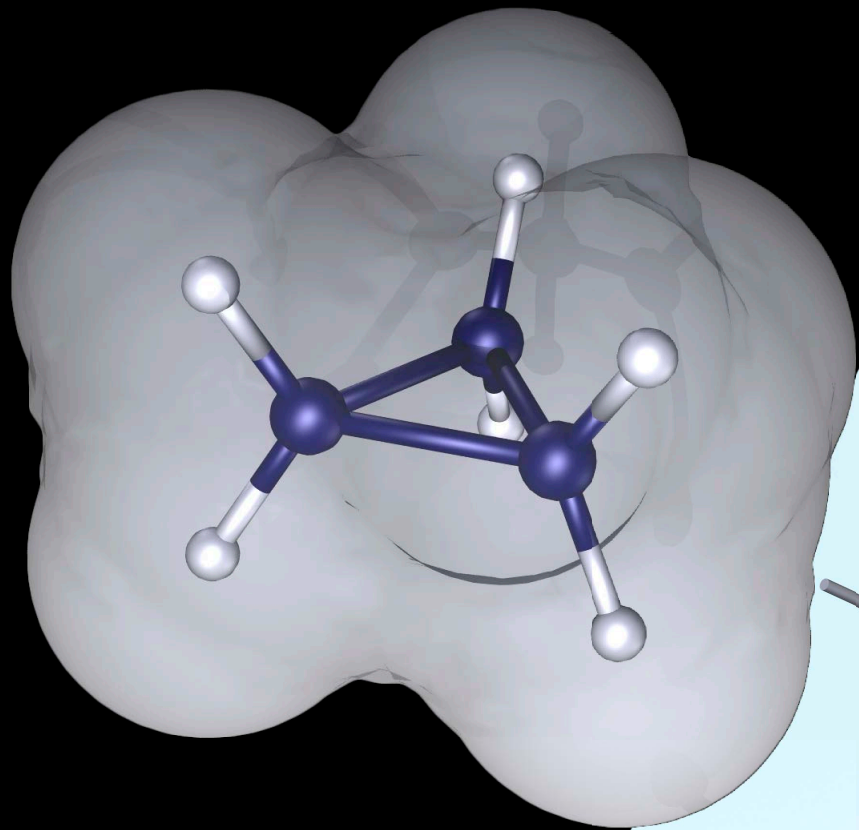
REALNA KONFORMACIJA MOLEKULA CIKLOALKANA NIJE PLANARNA (SUPROTNO ONOME ŠTO SUGERIŠU NJIHOVE PROJEKCIJE tj. 2D STRUKTURE.

OPTIMALNA (ENERGETSKI NAJPOVOLJNIJA) KONFORMACIJA MOLEKULA CIKLOALKANA TREBA DA ISPUNI SLEDEĆE USLOVE:

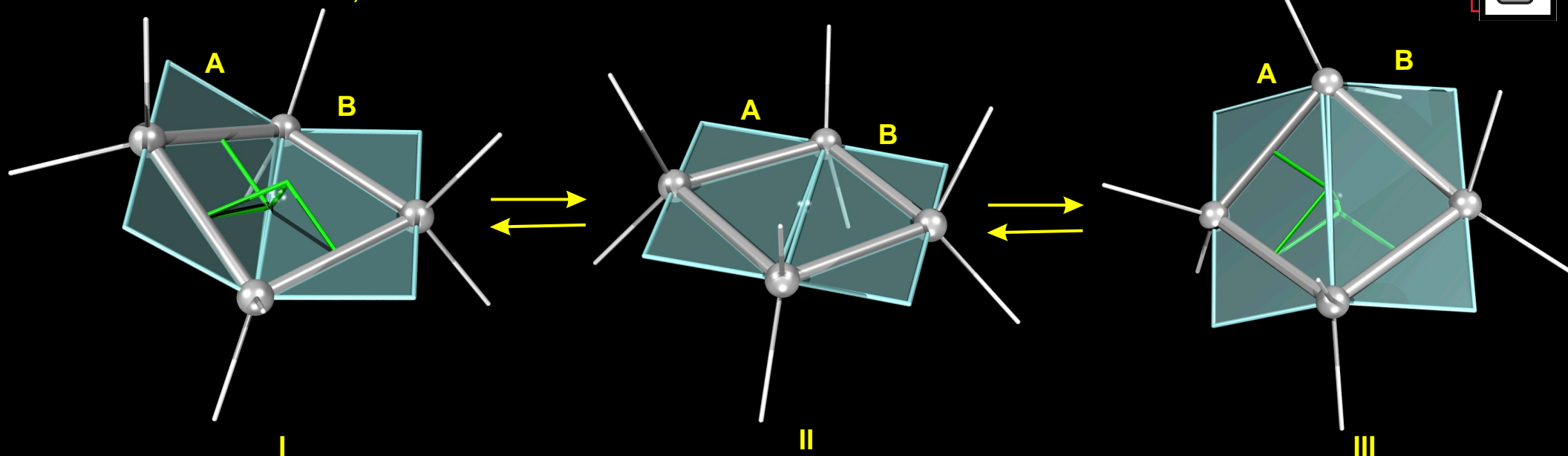
- 1) DA **ODSTUPANJE OD TETRAEDARSKOG UGLA** NA SVAKOM sp^3 HIBRIDIZOVANOM **C** ATOMU **BUDE MINIMALNO**
- 2) DA MEĐUSOBNO **ODBIJANJE SVIH SUPSTITUENATA U MOLEKULU (ATOMA I GRUPA)** **BUDE MINIMALNO**
- 3) DA DUŽINA SVIH VEZA U MOLEKULU **MINIMALNO ODSTUPA OD IDEALNIH VREDNOSTI**



STERNI NAPON PRSTENOVA OD 3 DO 14 ČLANOVA, U ODNOSU NA ACIKLČNE MOLEKULE

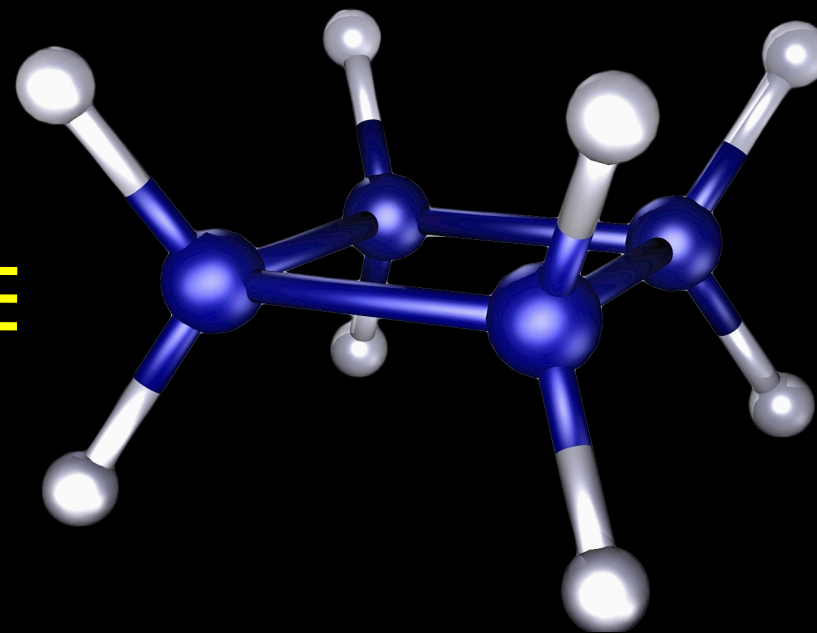
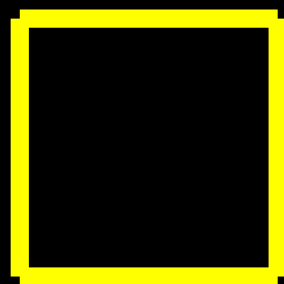


CIKLOBUTAN - NIJE PLANARAN JER JE TAKO ENERGETSKI POVOLJNIJE (MANJA SU STERNA ODBIJANA I DEFORMACIJE UGLOVA)

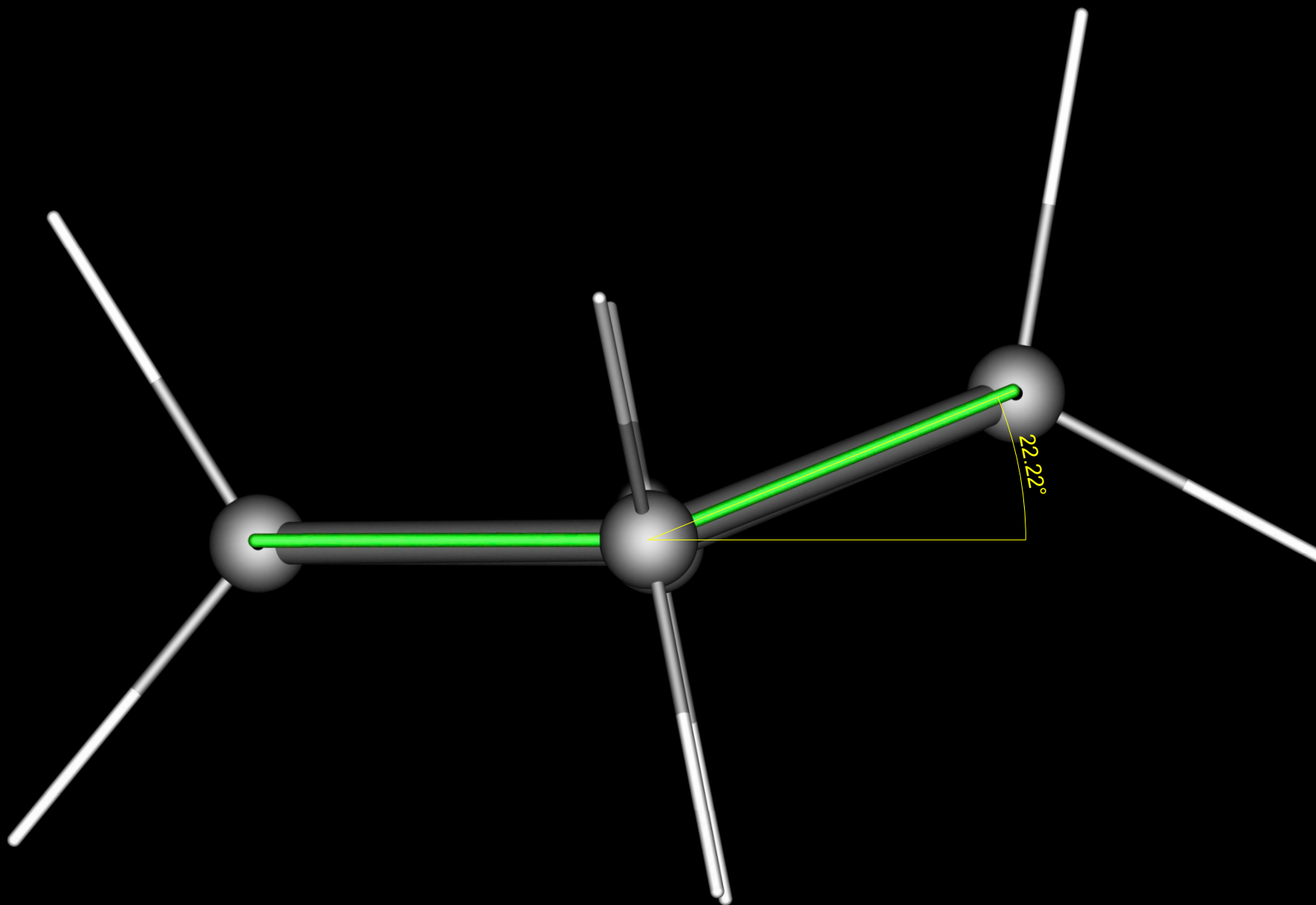


UGAO KOJI ZAKLAPAJU DVE RAVNI (A i B) JE
 26° ZA KONFORMACIJU I,
 0° ZA KONFORMACIJU II (PLANARNA)
 -26° ZA KONFORMACIJU III.
POD OBIČNIM USLOVIMA, KONFORMACIJE I i III BRZO

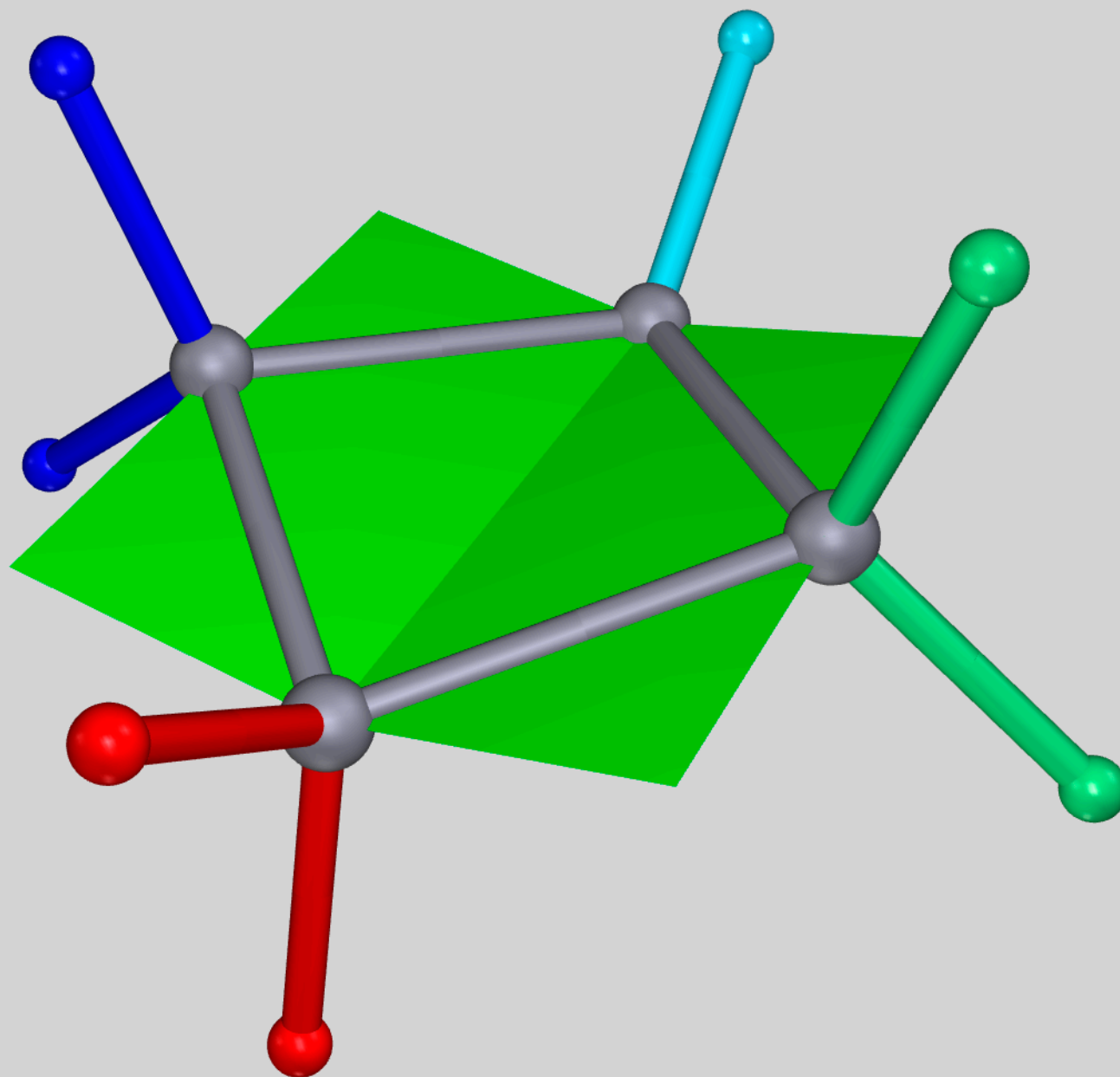
PRELAZE JEDNA U DRUGU, PREKO ENERGETSKI NEPOVOLJNE, PLANARNE KONFORMACIJE II.



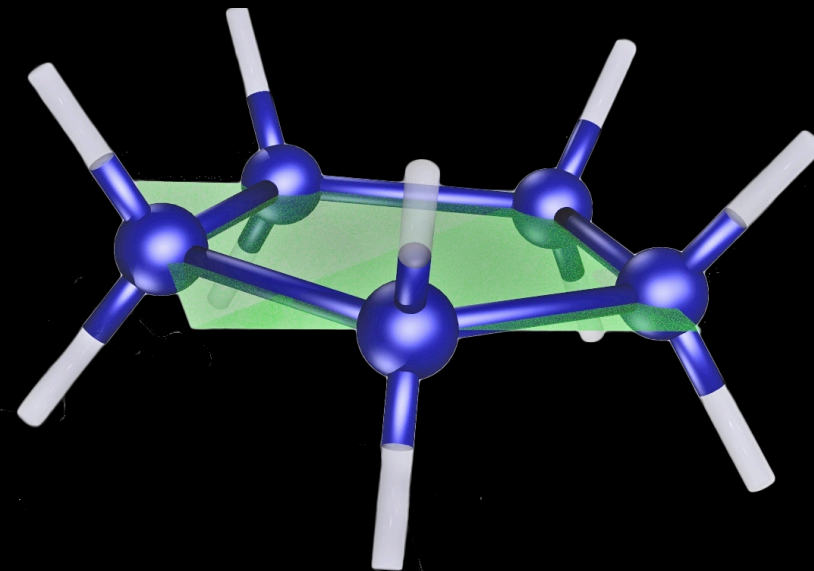
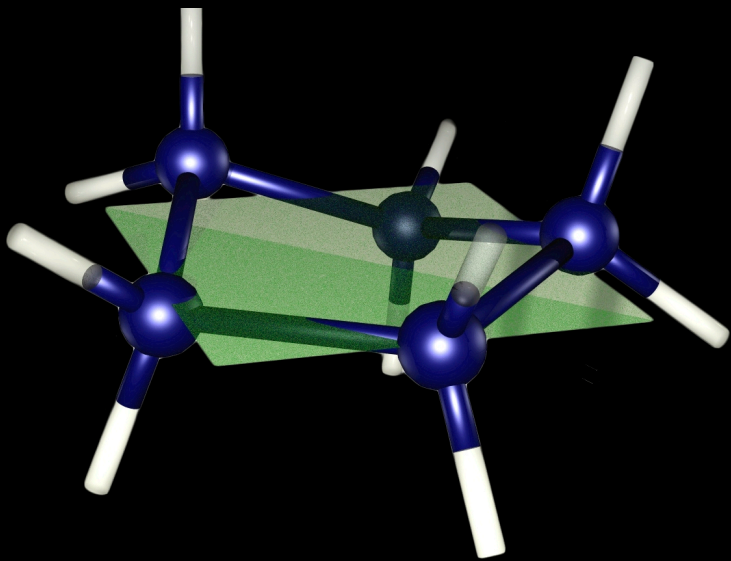
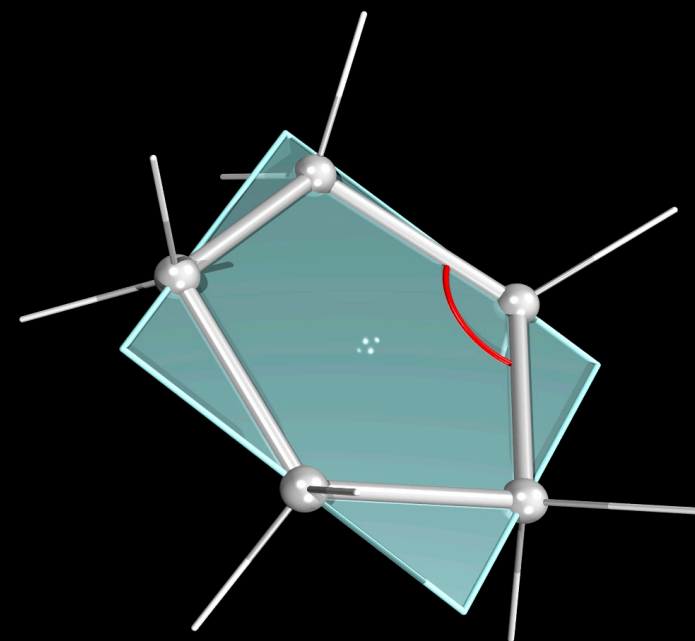
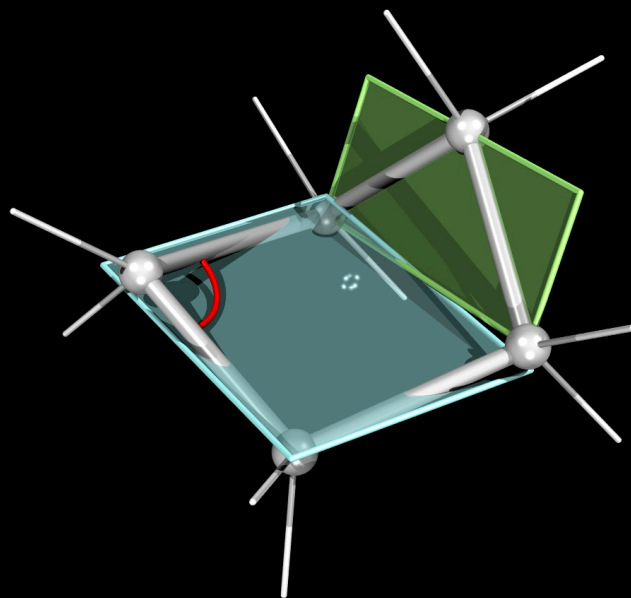
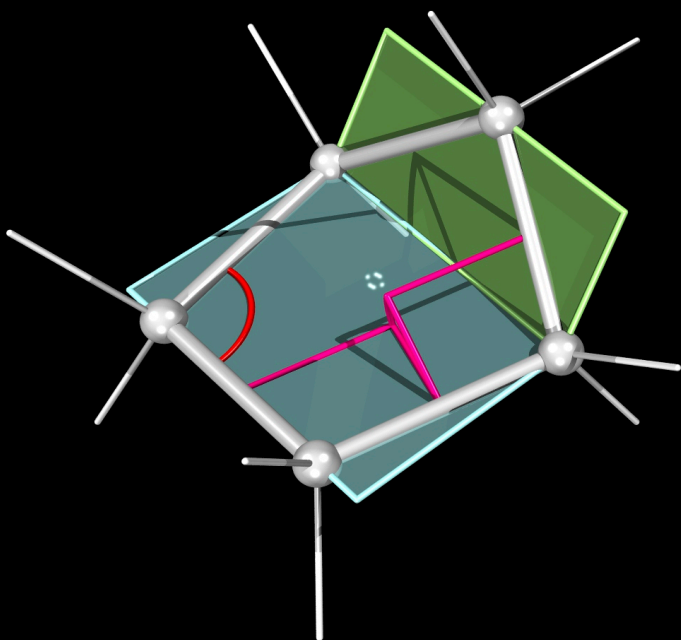
CIKLOBUTAN - PROJEKCIJA



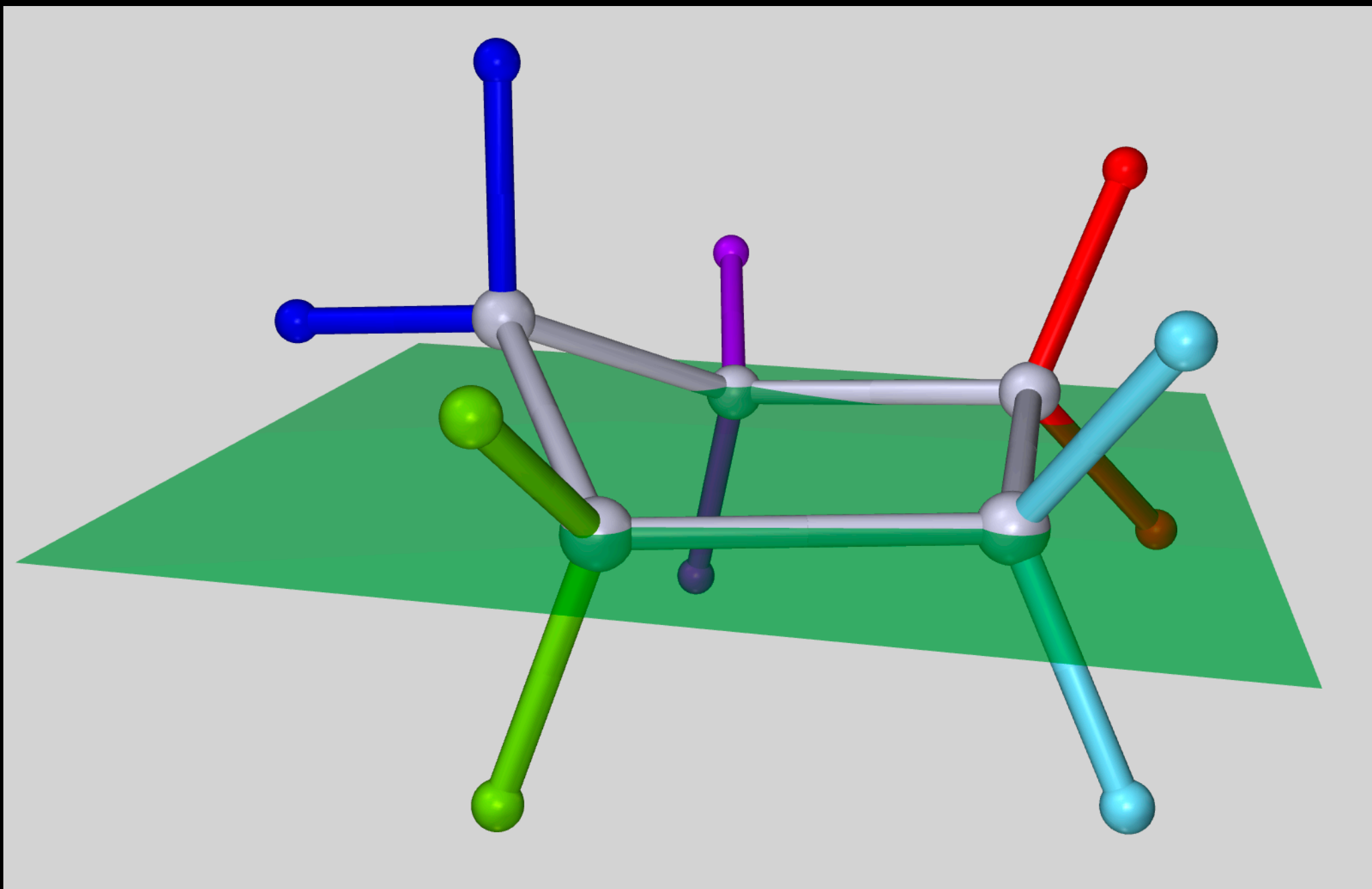
CIKLOBUTAN - 3D



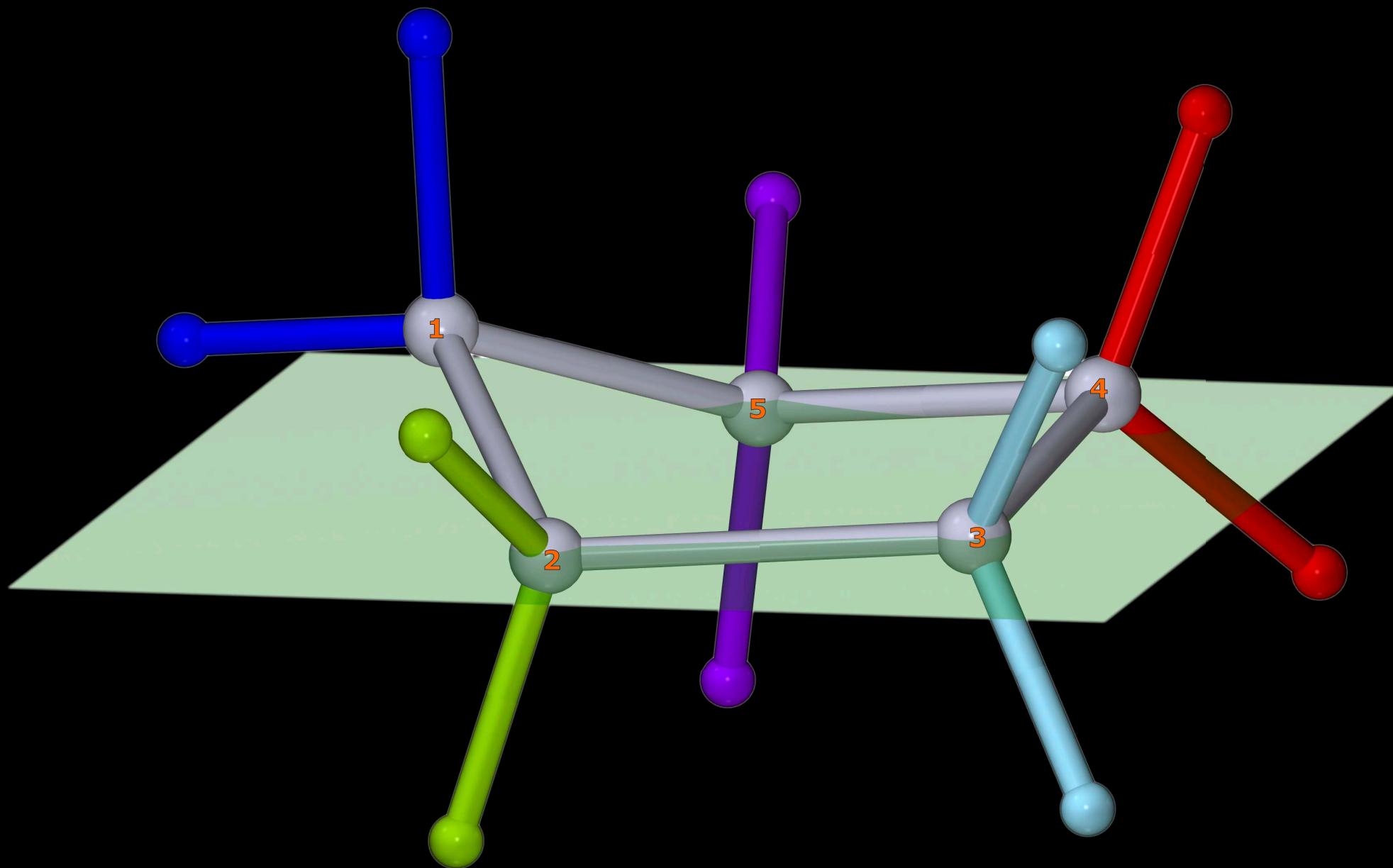
CIKLOPENTPENTANAN - NIJE PLANARAN JER JER JE TAKO ENERGETSKI POVOLJNIJE (MANJA SU STERNA ODBIJANA I DEFORMACIJE UGLOVA)



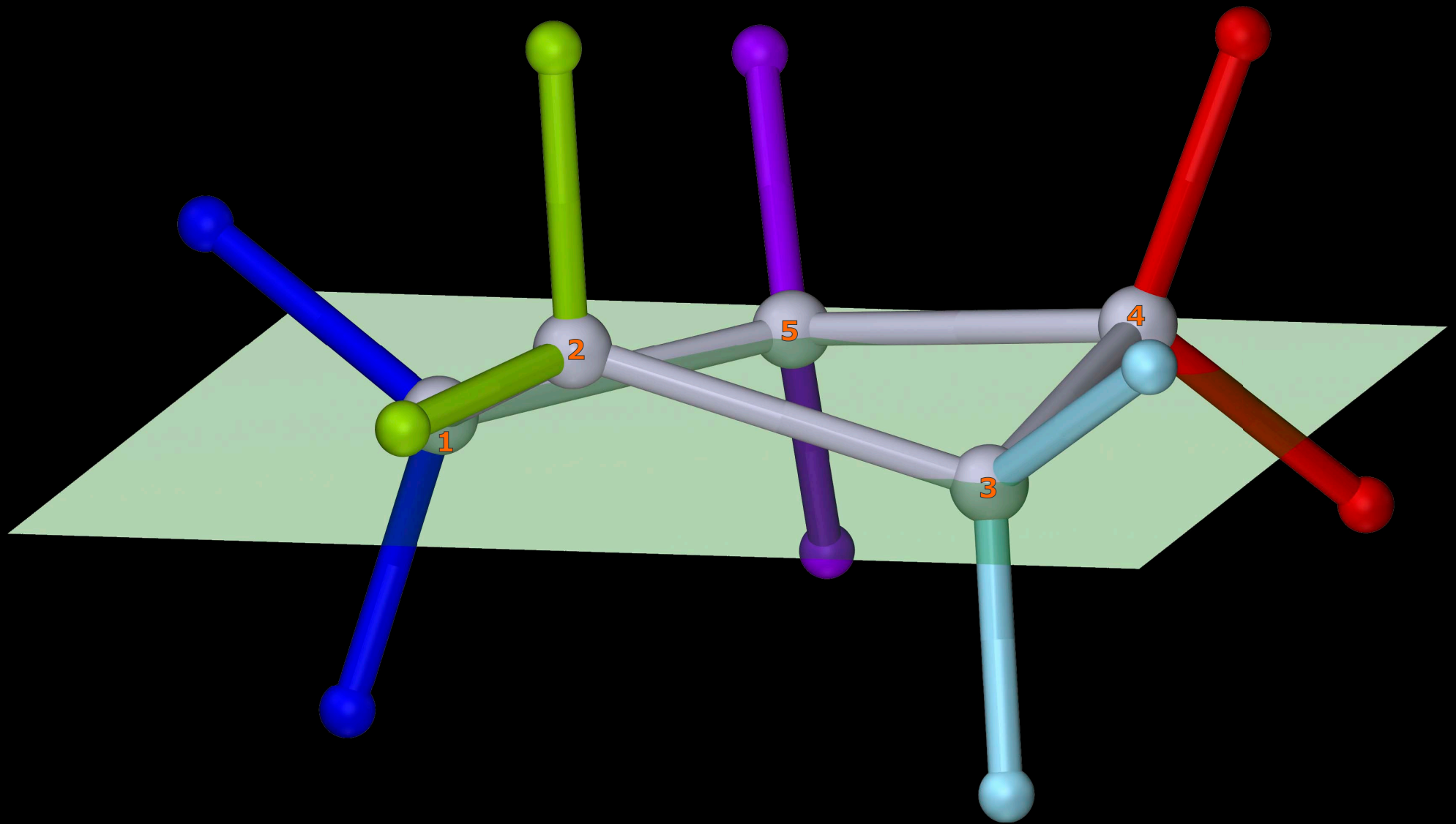
CIKLOPENTAN - 3D MODEL



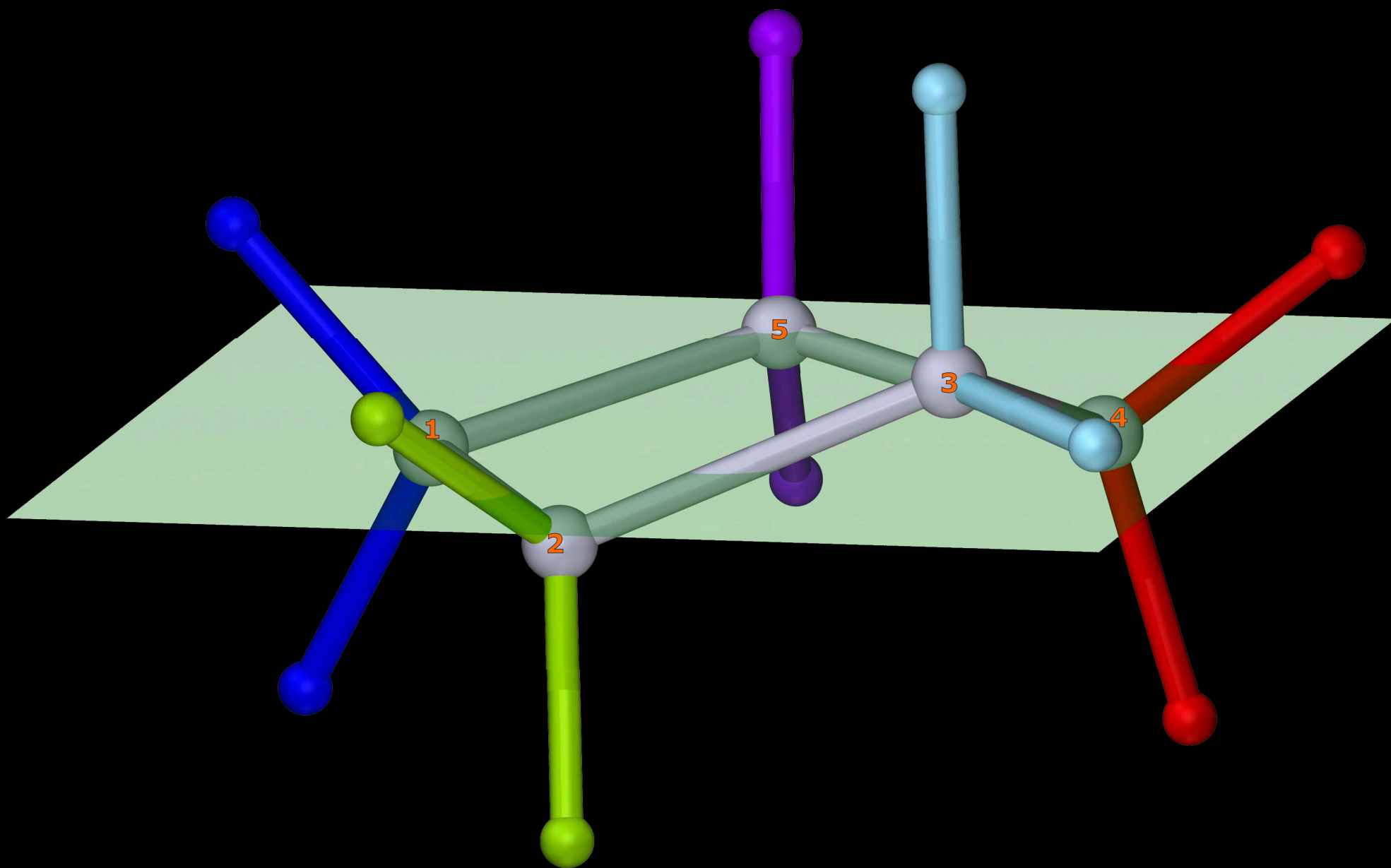
CIKLOPENTAN - EKVIVALENTNI KONFORMER 1



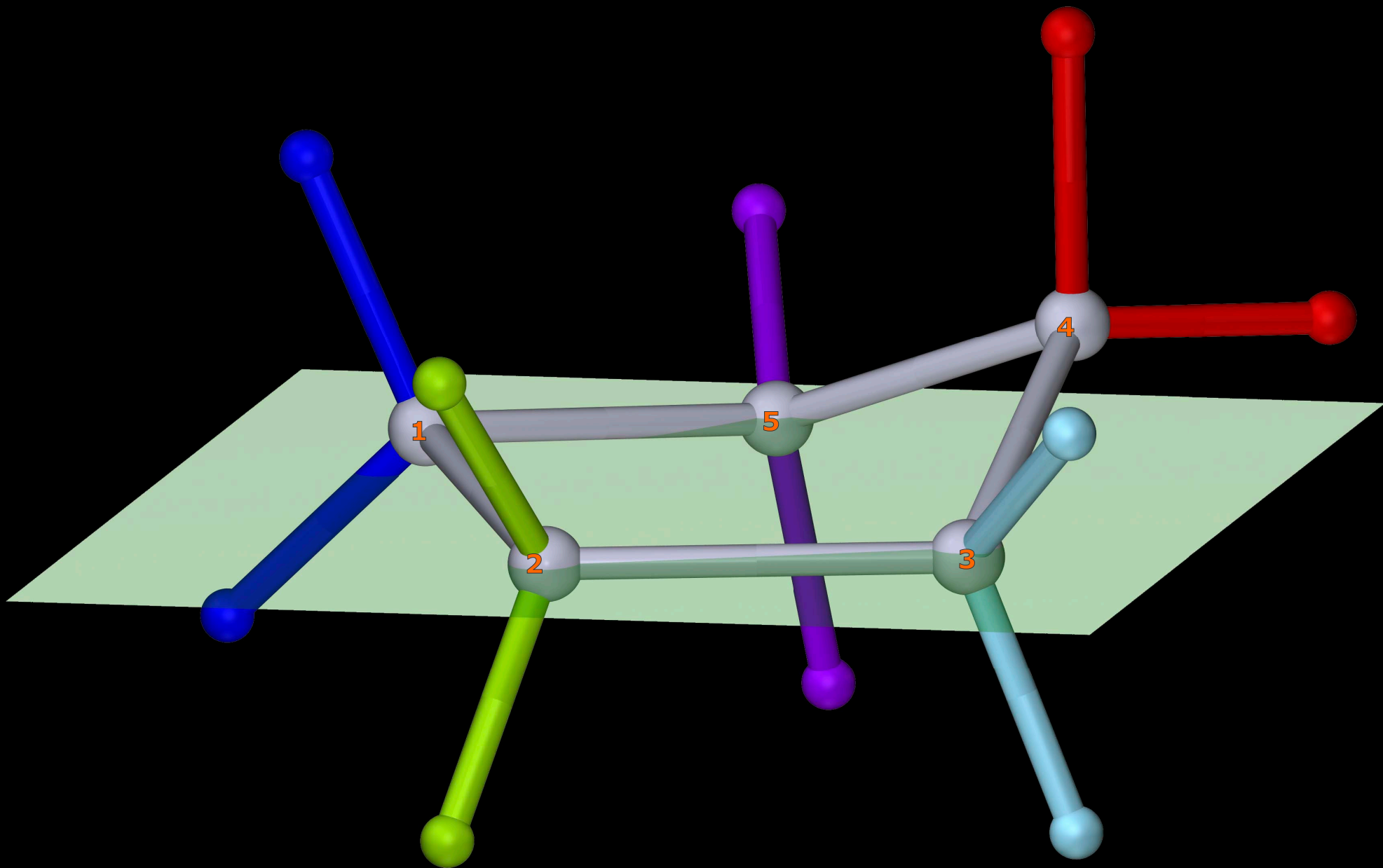
CIKLOPENTAN - EKVIVALENTNI KONFORMER 2



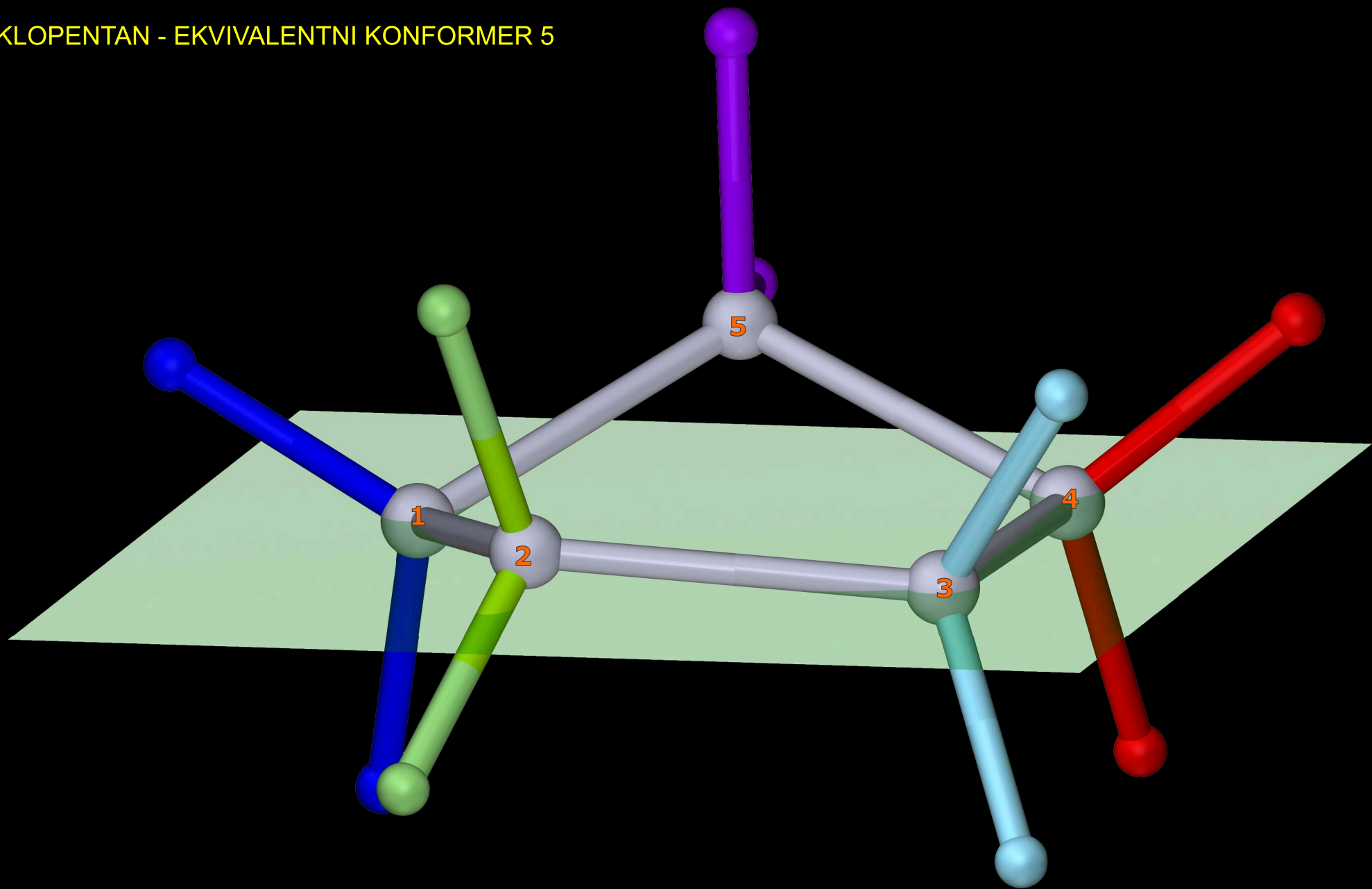
CIKLOPENTAN - EKVIVALENTNI KONFORMER 3



CIKLOPENTAN - EKVIVALENTNI KONFORMER 4



CIKLOPENTAN - EKVIVALENTNI KONFORMER 5

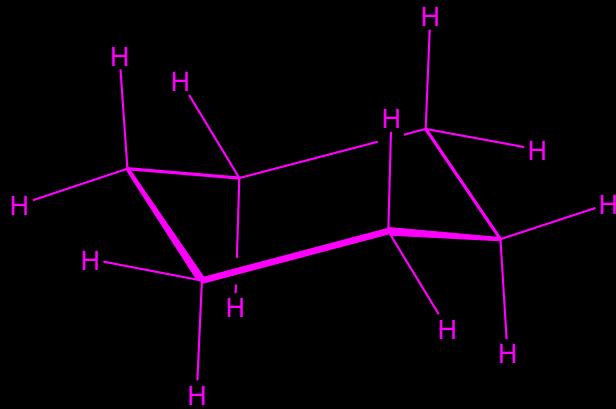


ZNAČAJNIJE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA I SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA

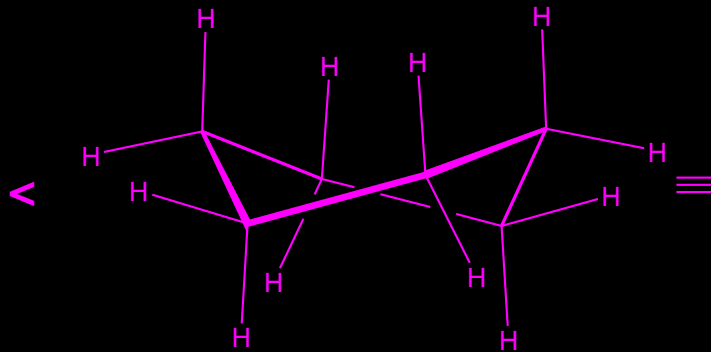


KAO I SVI DRUGI CIKLO-ALKANI (OSIM CIKLOPROPANA) I CIKLOHEKSAN MOŽE POSTOJATI U NEOGRANIČENOM BROJU RAZLIČITIH KONFORMACIJA. MEĐUTIM, ZA KONFORMACIONU

ANALIZU OD ZNAČAJA JE SVEGA NEKOLIKO GRANIČNIH KONFORMACIJA, ČIJE SU STRUKTURE PRIKAZANE. KONFORMACIONA ENERGIJA RASTE U NIZU:

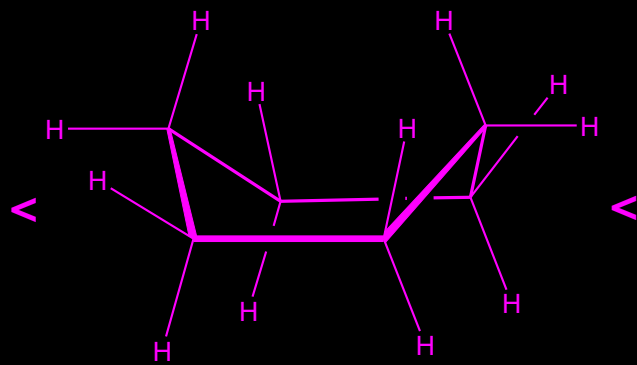
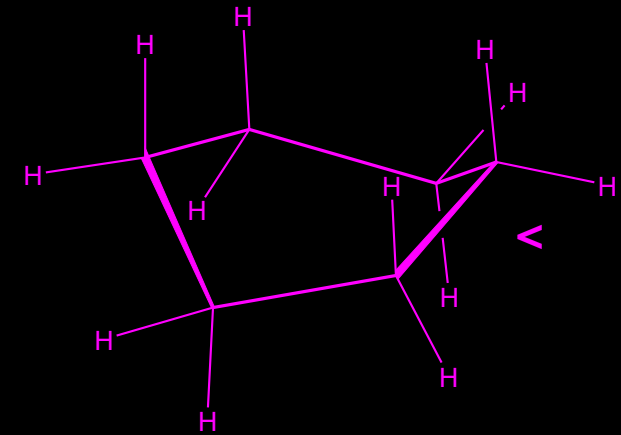


STOLICA 0,0 kcal/mol

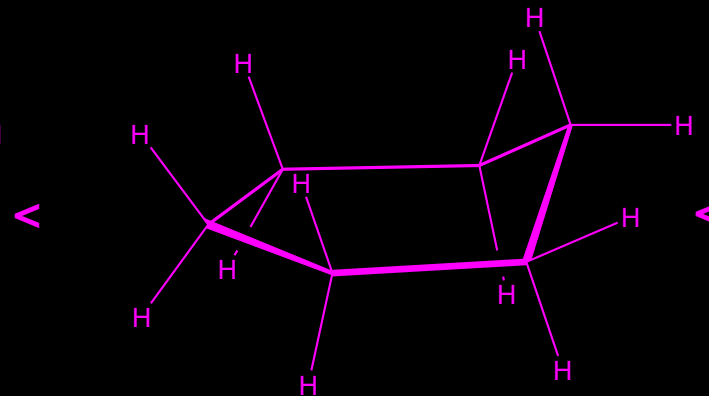


UVIJENA LAĐA

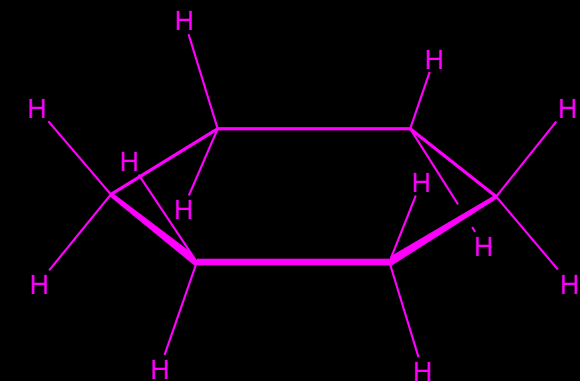
5,5 kcal/mol



LAĐA 6,9 kcal/mol



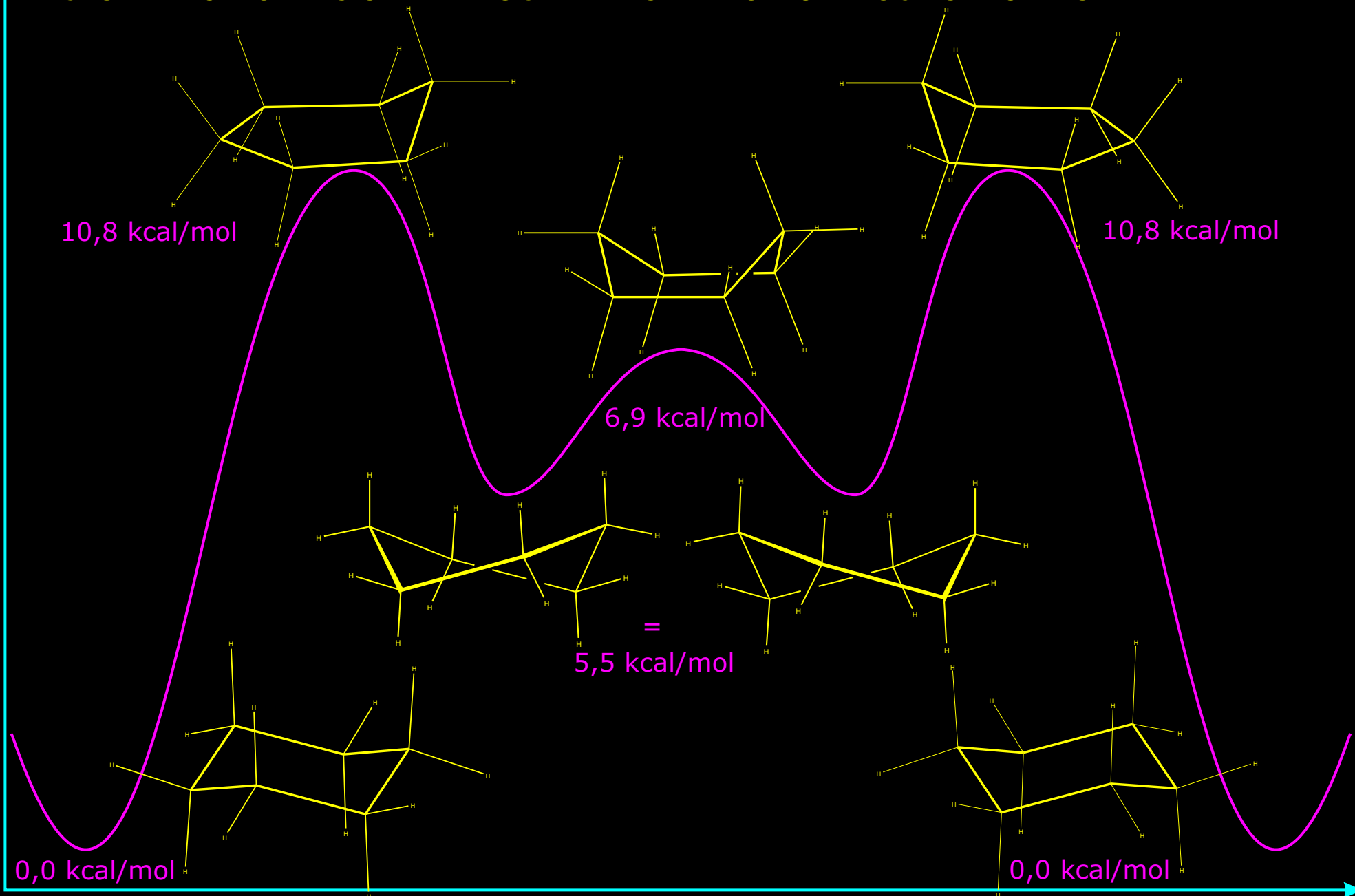
POLUSTOLICA 10,8 kcal/mol



PLANARNA STRUKTURA ~25-28 kcal/mol
(izaračunato GAUSSIAN 09 programom)

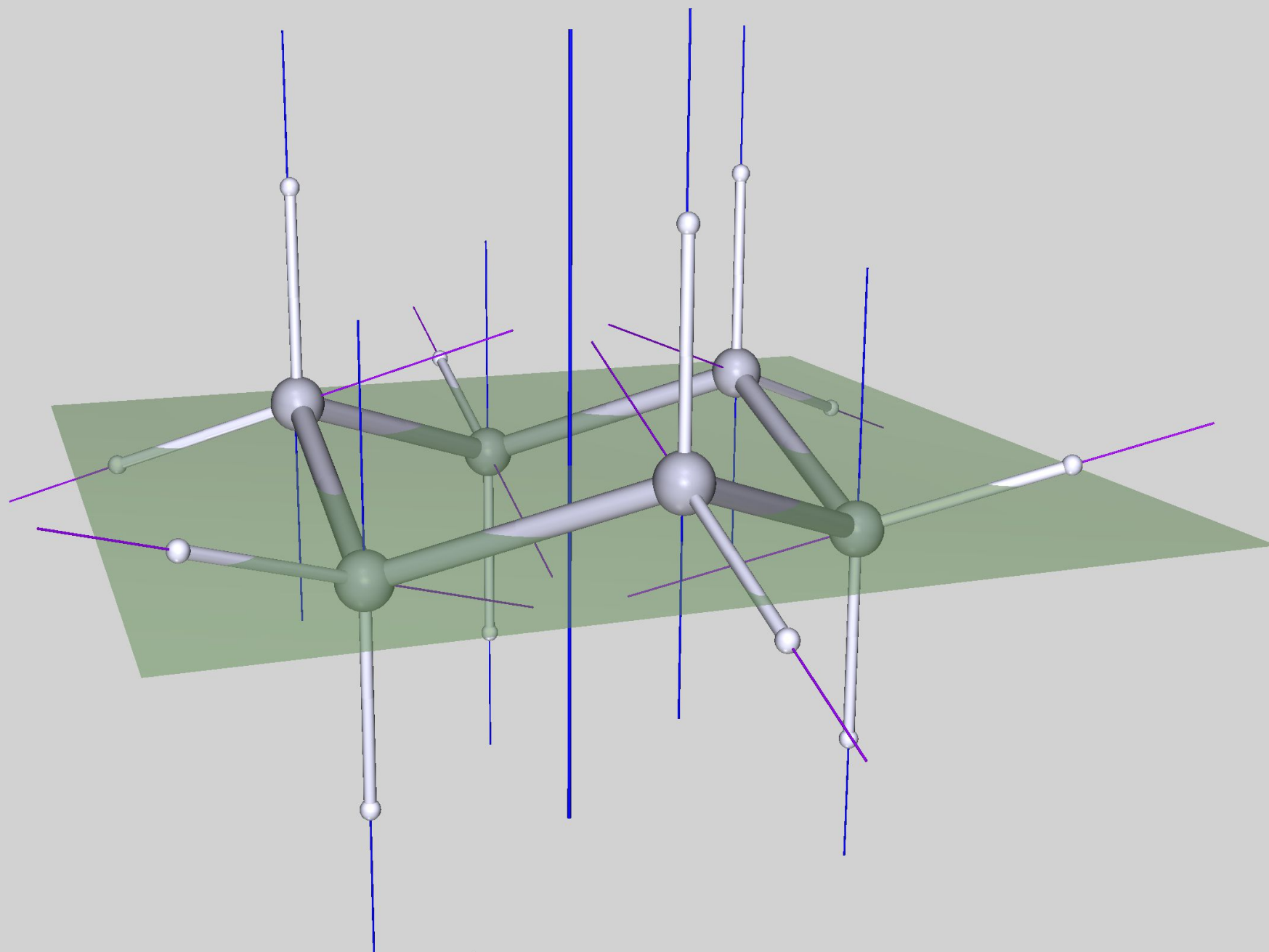
E

DIJAGRAM KONFORMACIONE ENERGIJE RAZLIČITIH KONFORMACIJA CIKLOHEKSANA

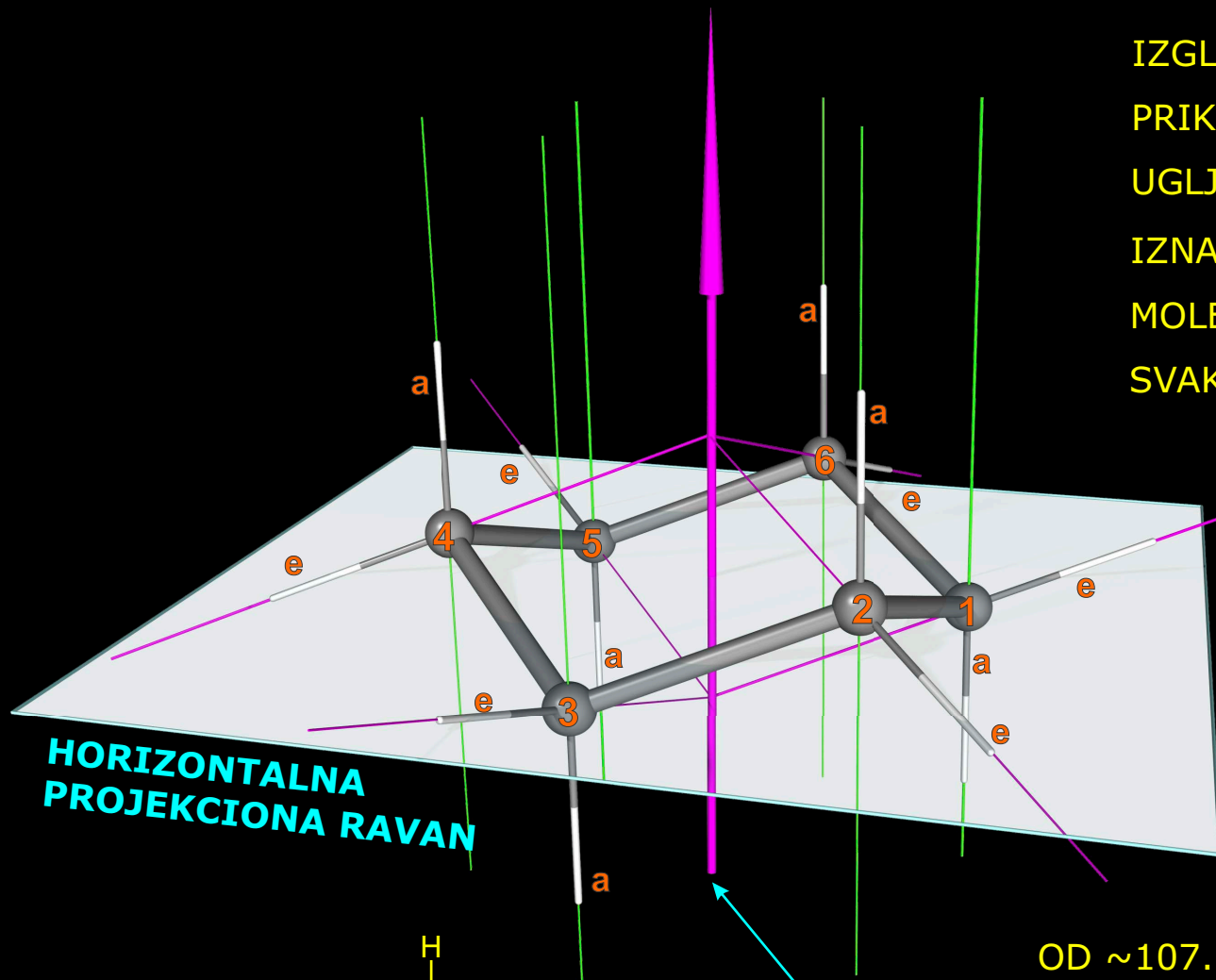


"REAKCIONA KOORDINATA" - VREME NA REAKCIONOJ SKALI ($\sim 10^{-6}$ s, 20°C)

GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE - 3D MODEL

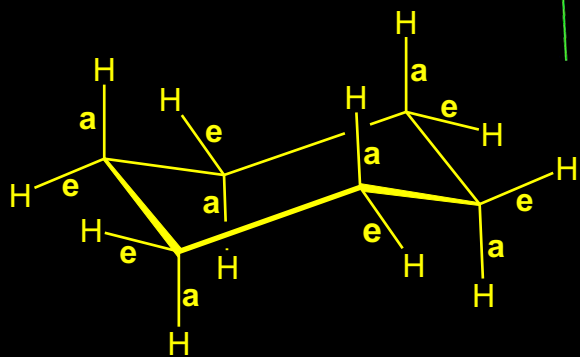


GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE



HORIZONTALNA
PROJEKCIJNA RAVAN

OSA ROTACIJE
CIKLOHEKSANA

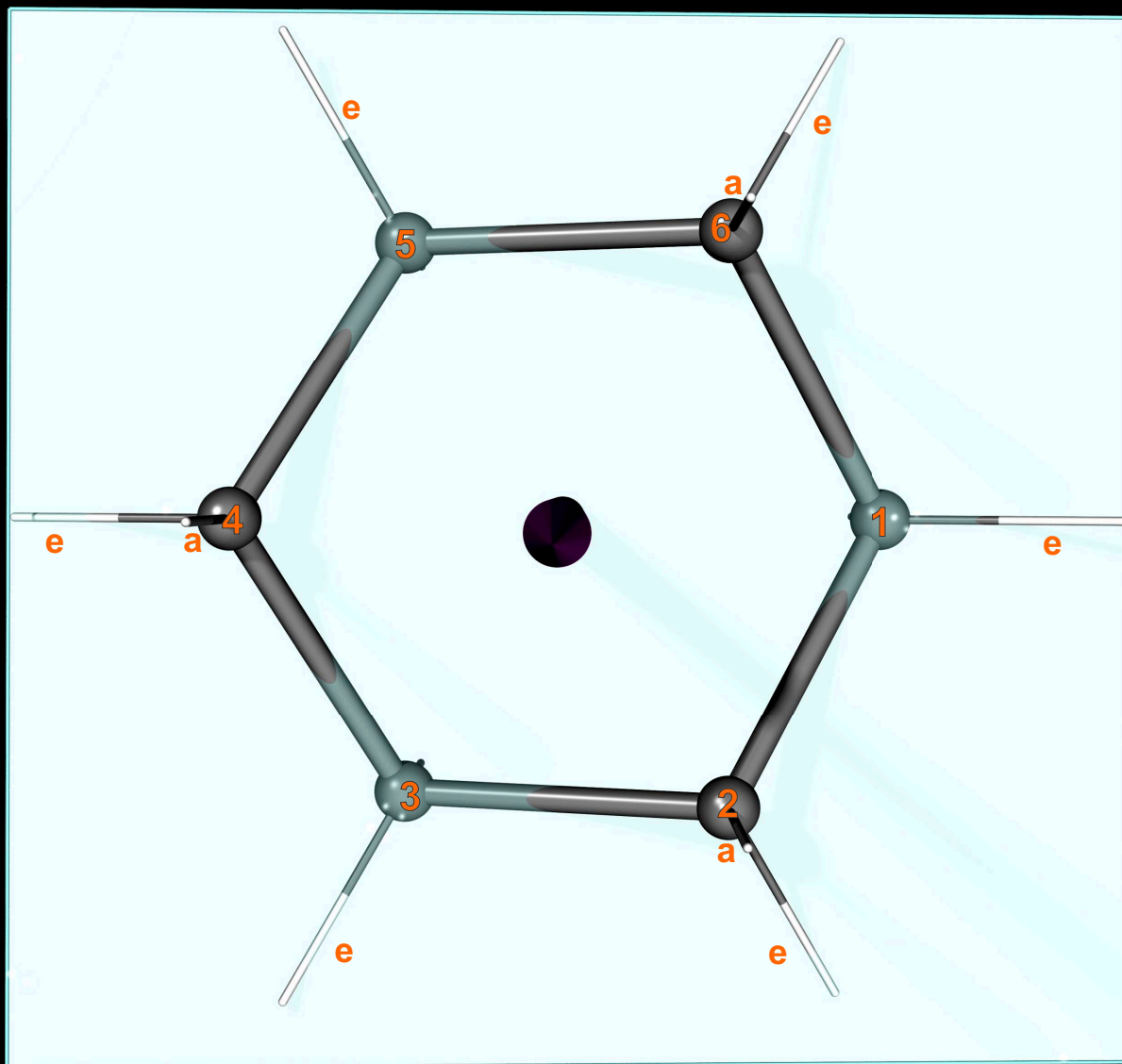


IZGLED MOLEKULA CIKLOHEKSANA
PRIKAZAN KAO "FOTOGRAFIJA" 3D MODELA.
UGLJENIKOVI ATOMI (C_1-C_6) NALAZE SE
IZNAD, ISPOD ILI U PROJEKCIJNOJ RAVNI
MOLEKULA. VODONIKOVI ATOMI, VEZANI ZA
SVAKI C-ATOM, MEĐUSOBNO SE RAZLIKUJU

SVOJOM GEOMETRIJOM. ONI
OBELEŽENI SA **a** OZNAČAVAJU SE
KAO AKSIJALNI JER SU NORMALNI
NA PROJEKCIJNU RAVAN A
PARALELNI OSI ROTACIJE.
VODONIKOVI ATOMI OBELEŽENI SA
e OZNAČAVAJU SE KAO
EKVATORIJALNI I ZAKLAPAJU UGAO

OD $\sim 107.5^\circ$ SA AKSIJALNIM H ATOMIMA. (SA
PROJEKCIJNOM RAVNI ZAKLAPAJU
UGAO $\pm 17.5^\circ$).

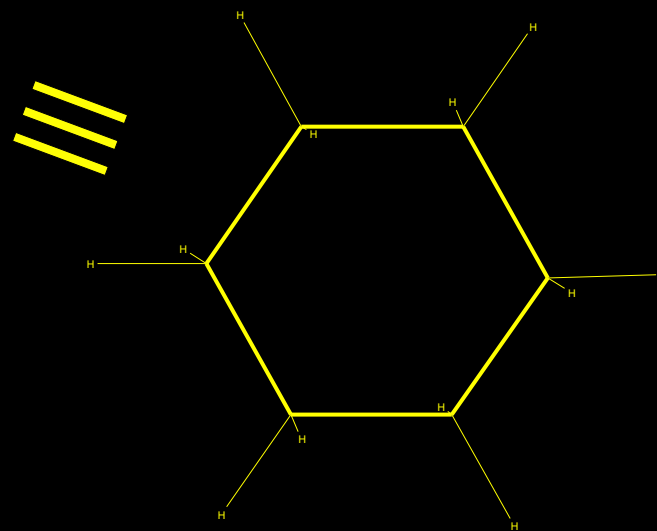
GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE



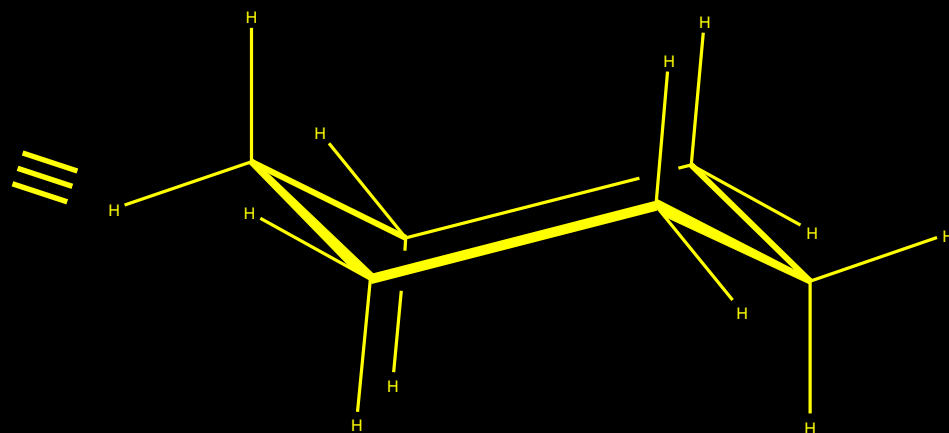
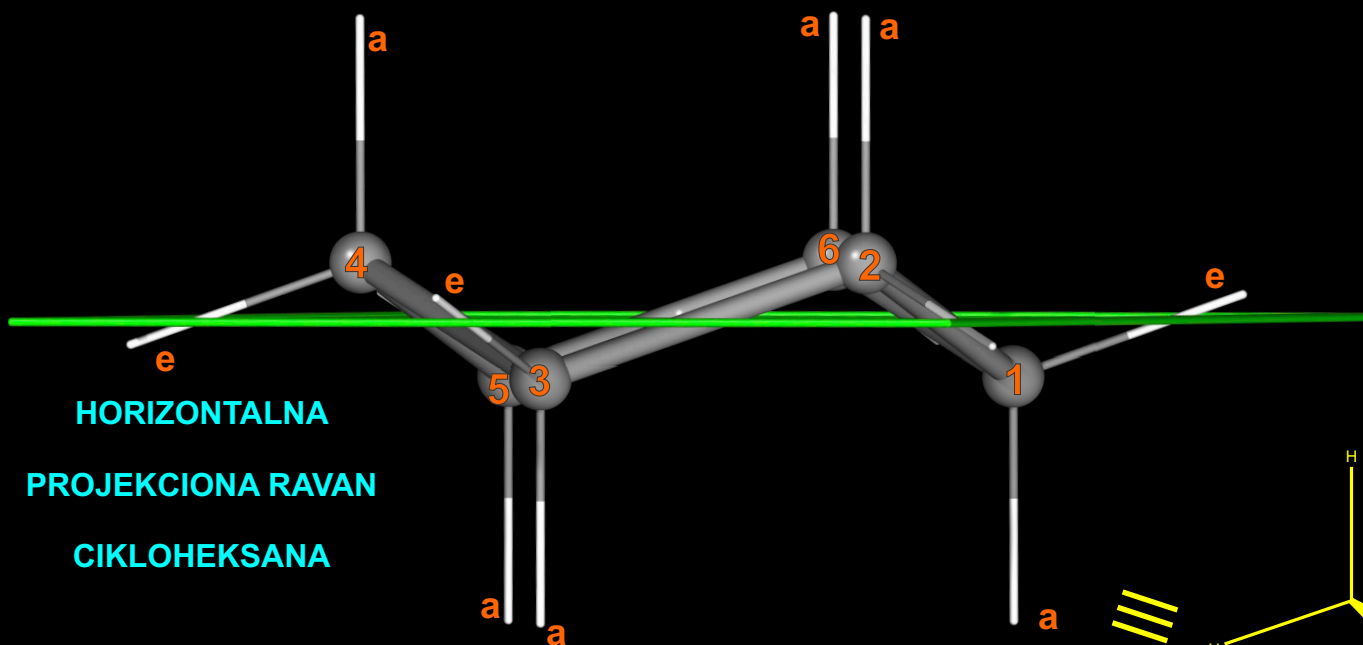
HORIZONTALNA PROJEKCIJA RAVAN CIKLOHEKSANA

IZGLED MOLEKULA CIKLOHEKSANA, PROJEKCIJA U PRAVCU OSE ROTACIJE. UGLJENIKOVI ATOMI C1, C3 I C5 NALAZE SE ISPOD PROJEKCIJNE RAVNI MOLEKULA A C2, C4 I C6 LEŽE IZNAD RAVNI.

EKVATORIJALNI I AKSIJALNI H ATOMI SU OBELEŽENI TAMO GDE SU VIDLJIVI, SLOVIMA *e* ODN. *a*.



GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE



IZGLED MOLEKULA CIKLOHEKSANA,
ORTOGONALNO NA PROJEKCIONU RAVAN.
UGLJENIKOVI ATOMI C1, C3 I C5 NALAZE
SE ISPOD PROJEKCIONE RAVNI MOLEKULA
A C2, C4 I C6 LEŽE IZNAD RAVNI.

EKVATORIJALNI I AKSIJALNI H ATOMI
SU OBELEŽENI TAMO GDE SU VIDLJIVI,
SLOVIMA **e** ODN. **a**.

GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE

KOD CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE SVE SUSEDNE VEZE SE MEĐUSOBNO NALAZE U KOSOJ (NE-EKLIPSNOJ) KONFORMACIJI, ČIME JE NJIHOVO MEĐUSOBNO ODBIJANJE SVEDENO NA MINIMUM.

SI.A PRIKAZUJE PERSPEKTIVNU PROJEKCIJU CIKLOHEKSANA.

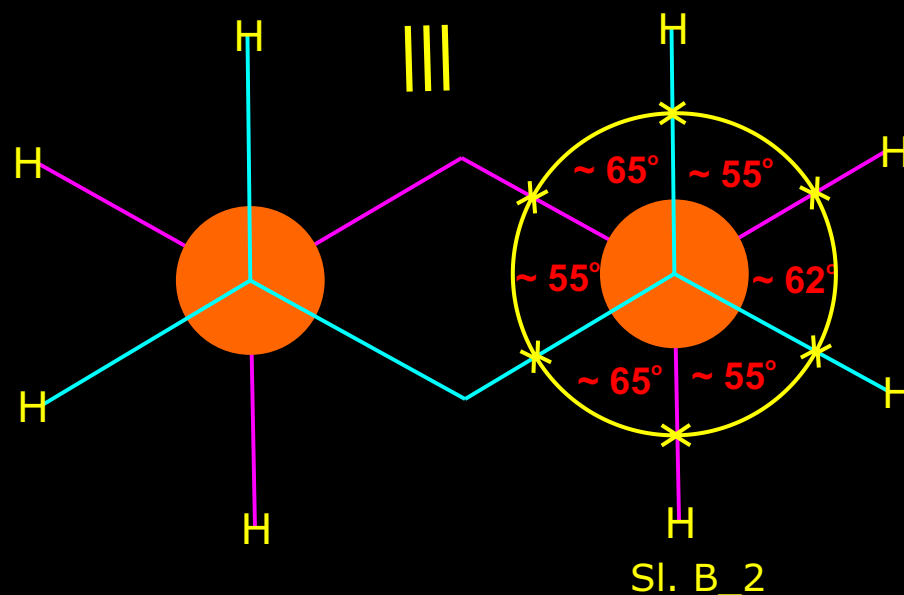
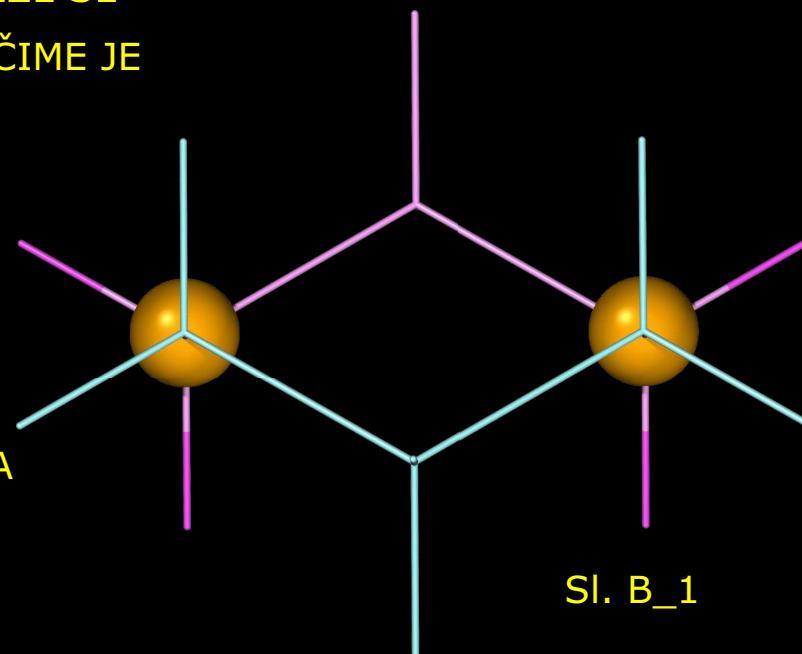
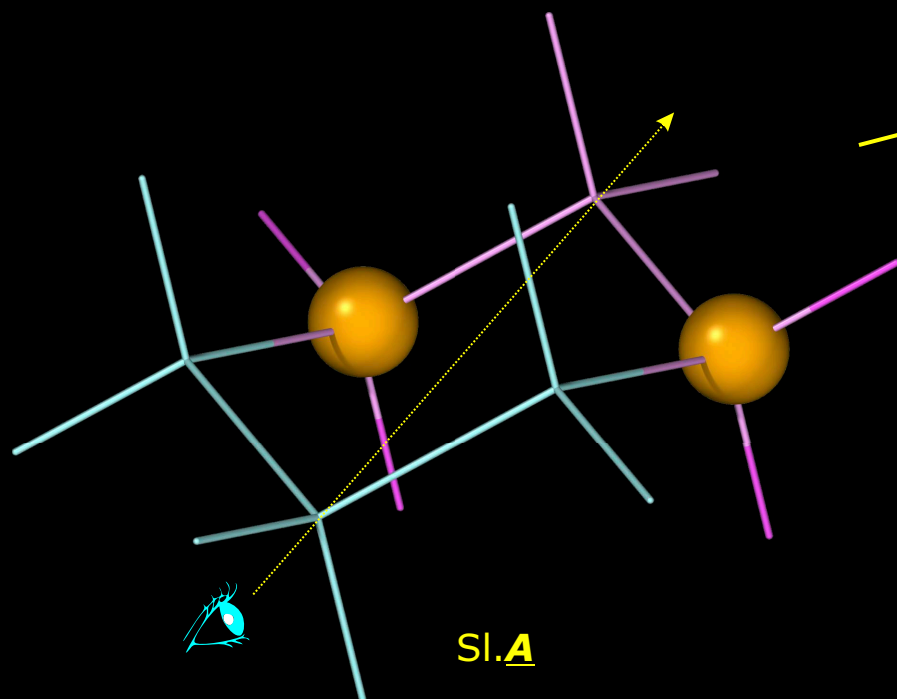
(DVA C ATOMA PRIKAZANI SU U OBLIKU SFERA, A OSTALI KAO LINIJE.)

KADA SE OVA STRUKTURA POSMATRA IZ

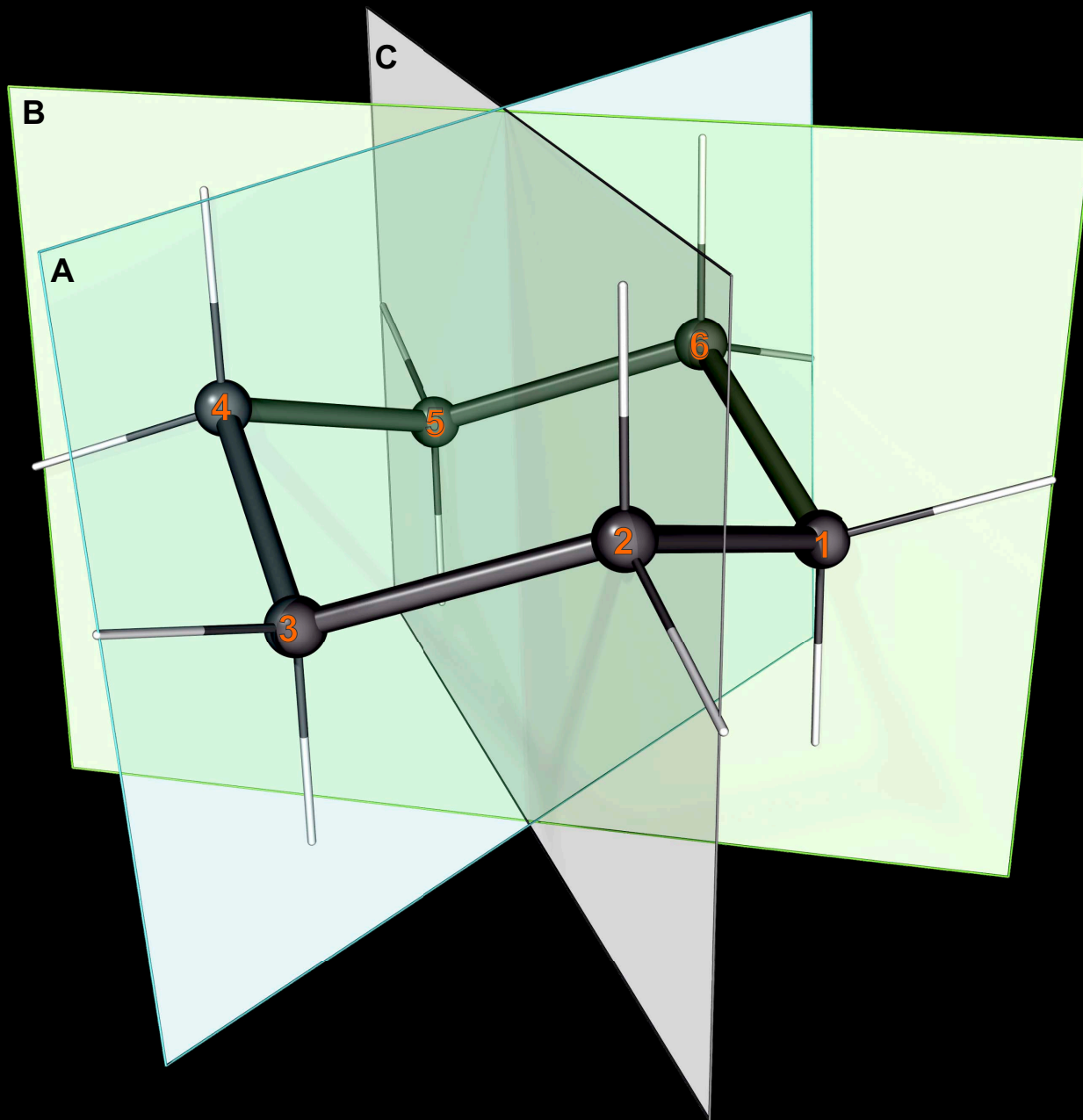
OZNAČENOG PRAVCA VIDI SE PROJEKCIJA PRIKAZANA

NA SI.B_1. SHEMATSKI PRIKAZ ISTE PROJEKCIJE JE NEWMAN-OVA

PROJEKCIONA FORMULA, SI.B_2

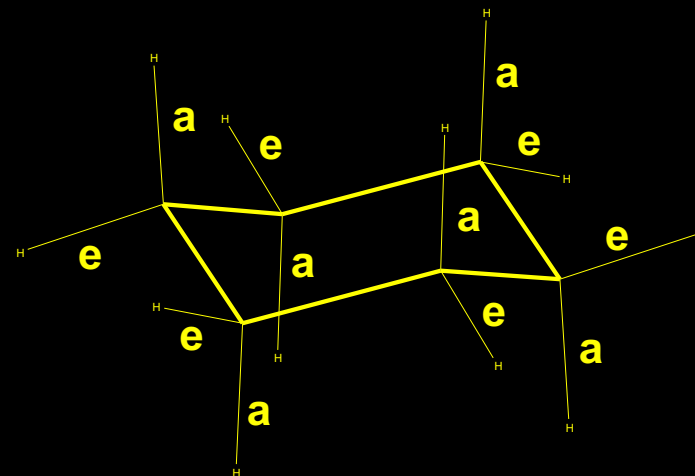


GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE



CIKLOHEKSAN U KONFORMACIJI STOLICE IMA TRI RAVNI SIMETRIJE KOJE DELE MOLEKUL NA DVA JEDNAKA DELA (KAO PREDMET I LIK U OGLEDALU), SI.A

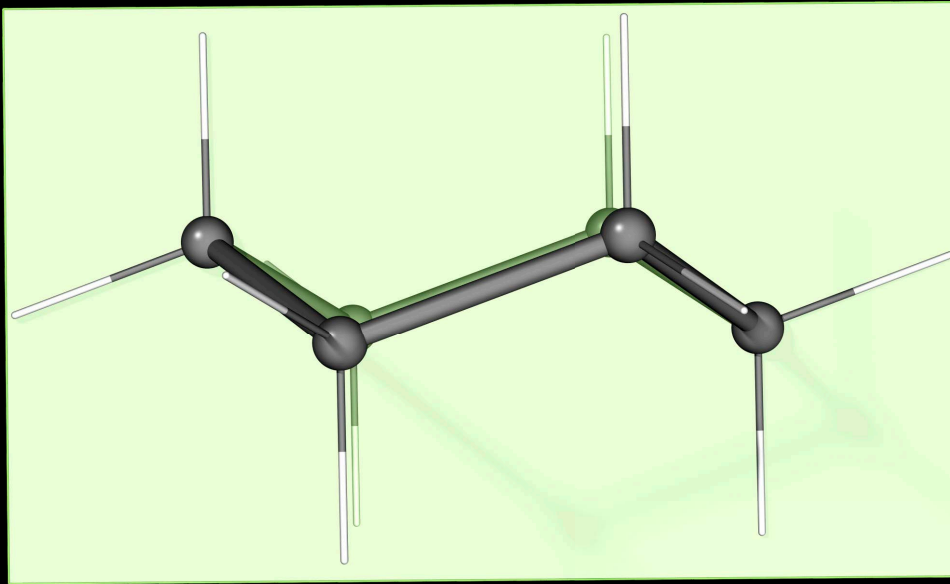
SI.A PRIKAZUJE KONFORMACIONU FORMULU ISTOG MOLEKULA, SA OBELEŽENIM VODONIKOVIM ATOMIMA.



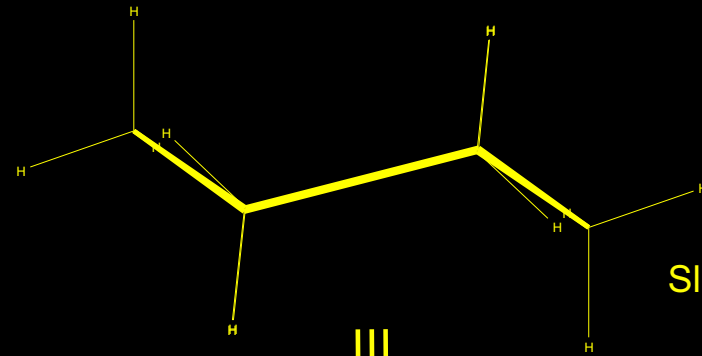
GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE

SIMETRIJSKE RAVNI CIKLOHEKSANA TAKOĐE SU I VERTIKALNE PROJEKCIJE RAVNI (SI.A_1).

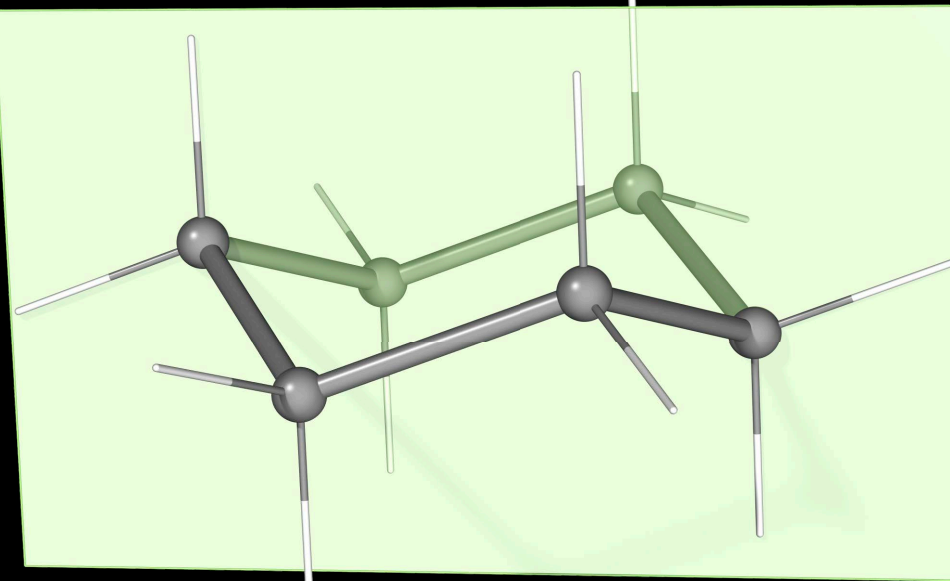
KOSA PROJEKCIJA 3D MODELA CIKLOHEKSANA (SI. B_2) KORISTI SE ZA STANDARDNU KONFORMACIONU FORMULU CIKLOHEKSANA.



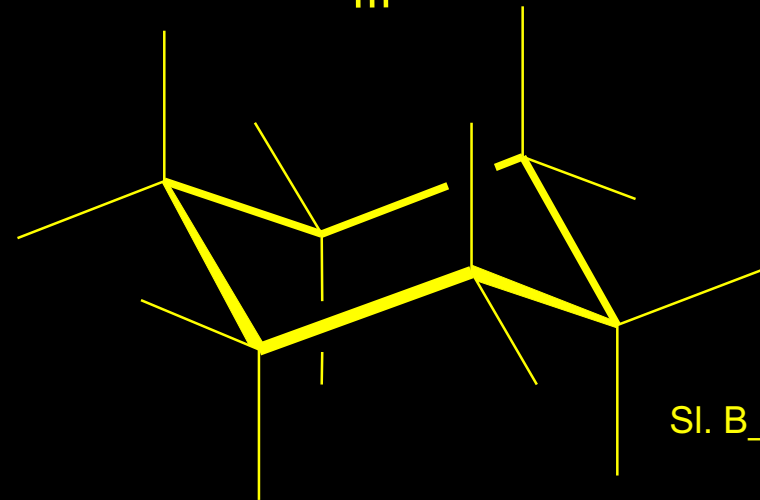
SI.A_1



SI. B_1



SI.A_2



SI. B_2

GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE



CIKLOHEKSAN U KONFORMACIJI STOLICE TAKOĐE IMA I OSU SIMETRIJE TREĆEG REDA, SL. A

KADA SE STRUKTURA I ZAROTIRA OKO OSE SIMETRIJE ZA 120° DOBIJA SE STRUKTURA II KOJA IMA IDENTIČNU

GEOMETRIJU KAO I STRUKTURA

I. ROTACIJOM STRUKTURE II

ZA DALJIH 120° POSTAJE

STRUKTURA III, TAKOĐE

IDENTIČNE GEOMETRIKE

KAO I I II. ROTACIJOM ZA

JOŠ 120° ZATVARA SE PUN

KRUG.

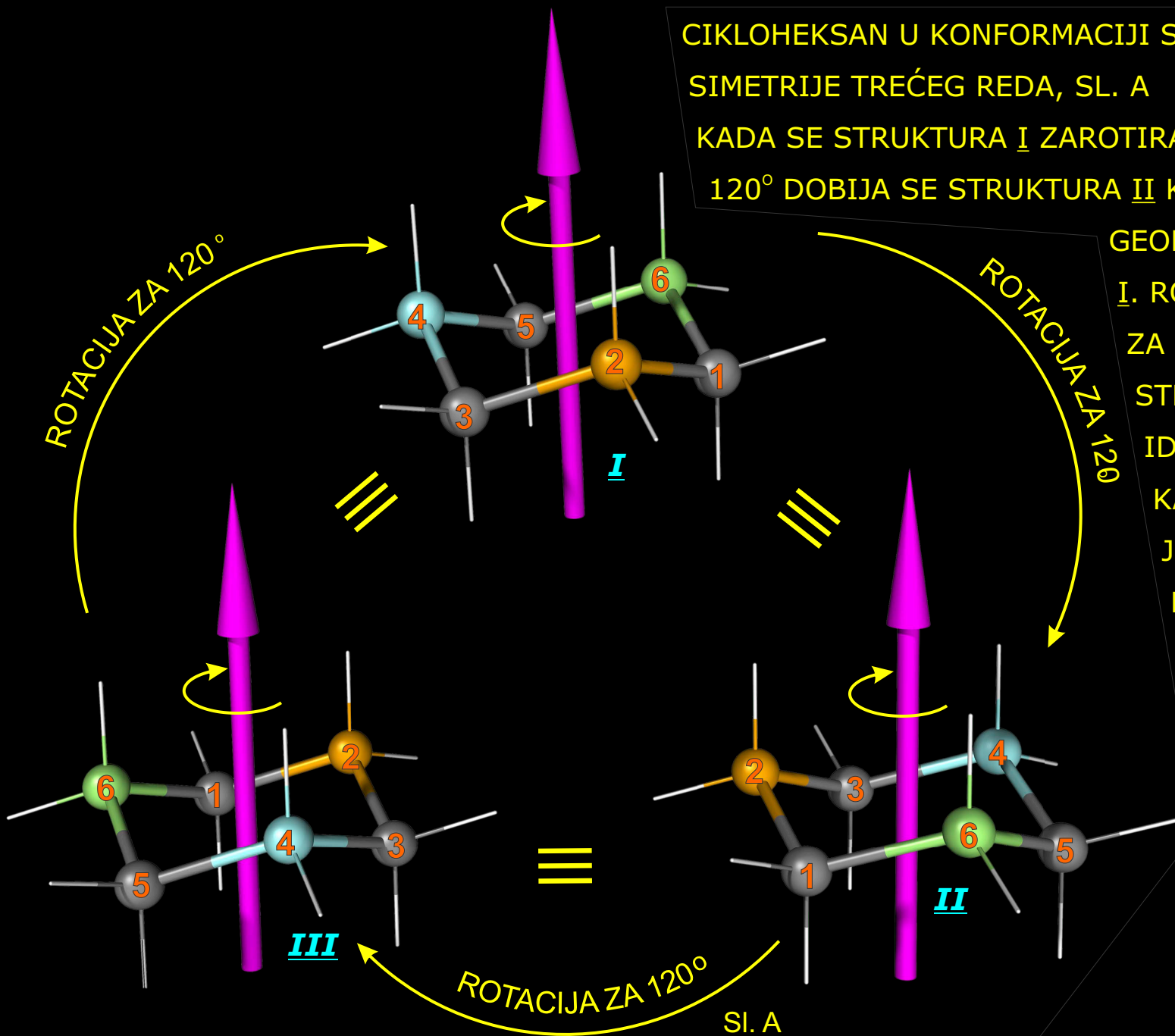
(UGLJENIKOVI ATOMI 2,4 I

6 OBELEŽENI SU

RAZLIČITIM BOJAMA

ISKLUČIVO RADI

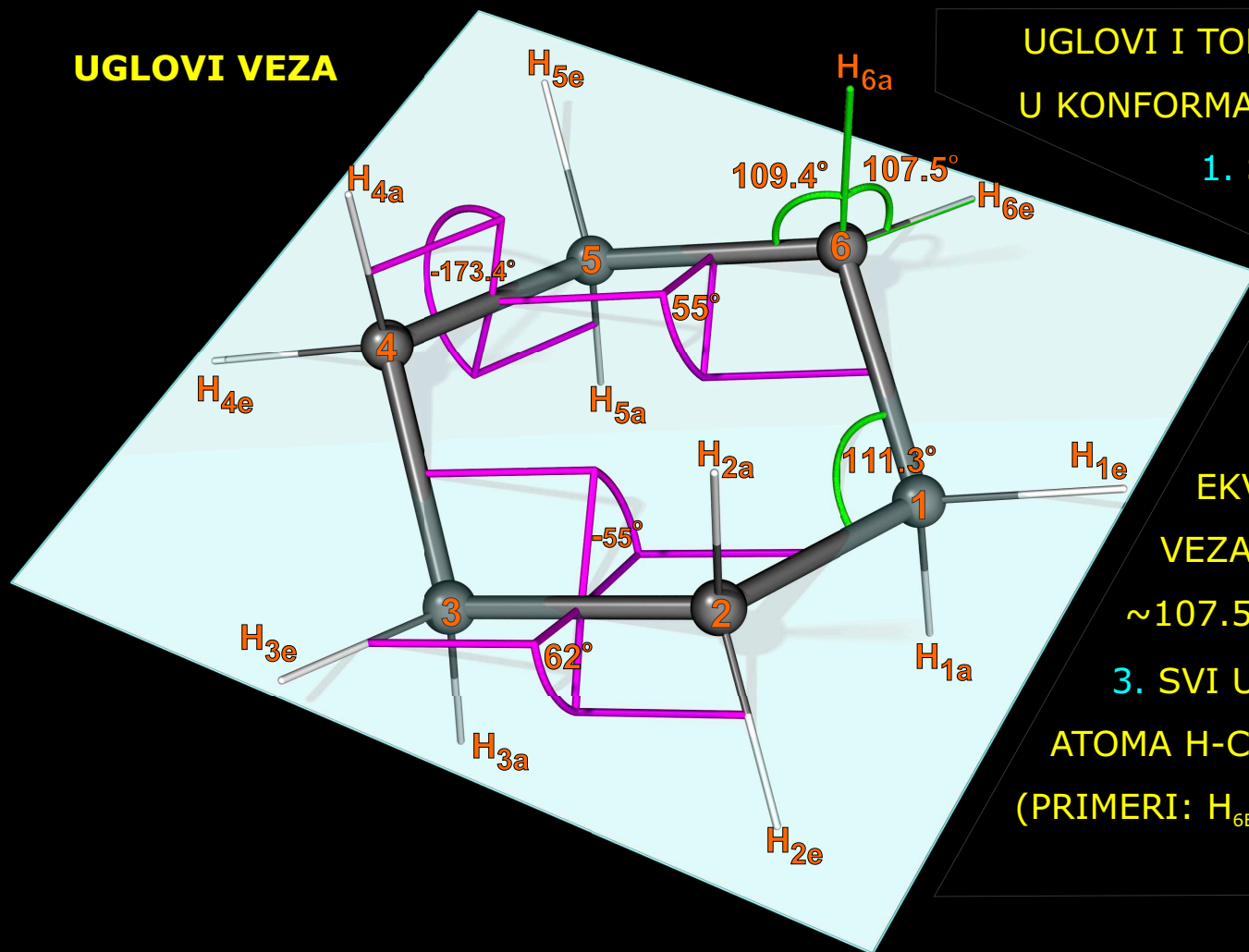
RAZLIKOVANJA).



Sl. A

GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE - SAMO INFORMATIVNO

UGLOVI VEZA



UGLOVI I TORZIONI UGLOVI KOD CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE.

4. SVI TORZIONI UGLOVI KOJE ZAKLAPAJU 4 SUSEDNA C ATOMA IMAJU ISTU VREDNOST ($\sim \pm 55^\circ$). (PRIMER: $C_1-C_2-C_3-C_4 = 55^\circ$).

5. SVI TORZIONI UGLOVI KOJE ZAKLAPAJU 4 SUSEDNA ATOMA I TO: $H_E-C-C-H_E$ IMAJU ISTU

1. SVI UGLOVI KOJE ZAKLAPAJU 3 SUSEDNA C ATOMA U PRSTENU IMAJU ISTU VREDNOST, $\sim 111.3^\circ$. (PRIMER: $C_1-C_6-C_5$).

2. SVI UGLOVI KOJE ZAKLAPAJU EKVATORIJALNI I AKSIJALNI H ATOMI VEZANI ZA ISTI C ATOM IZNOSE. $\sim 107.5^\circ$. (PRIMER: $H_{1A}-C_1-H_{1E}$).

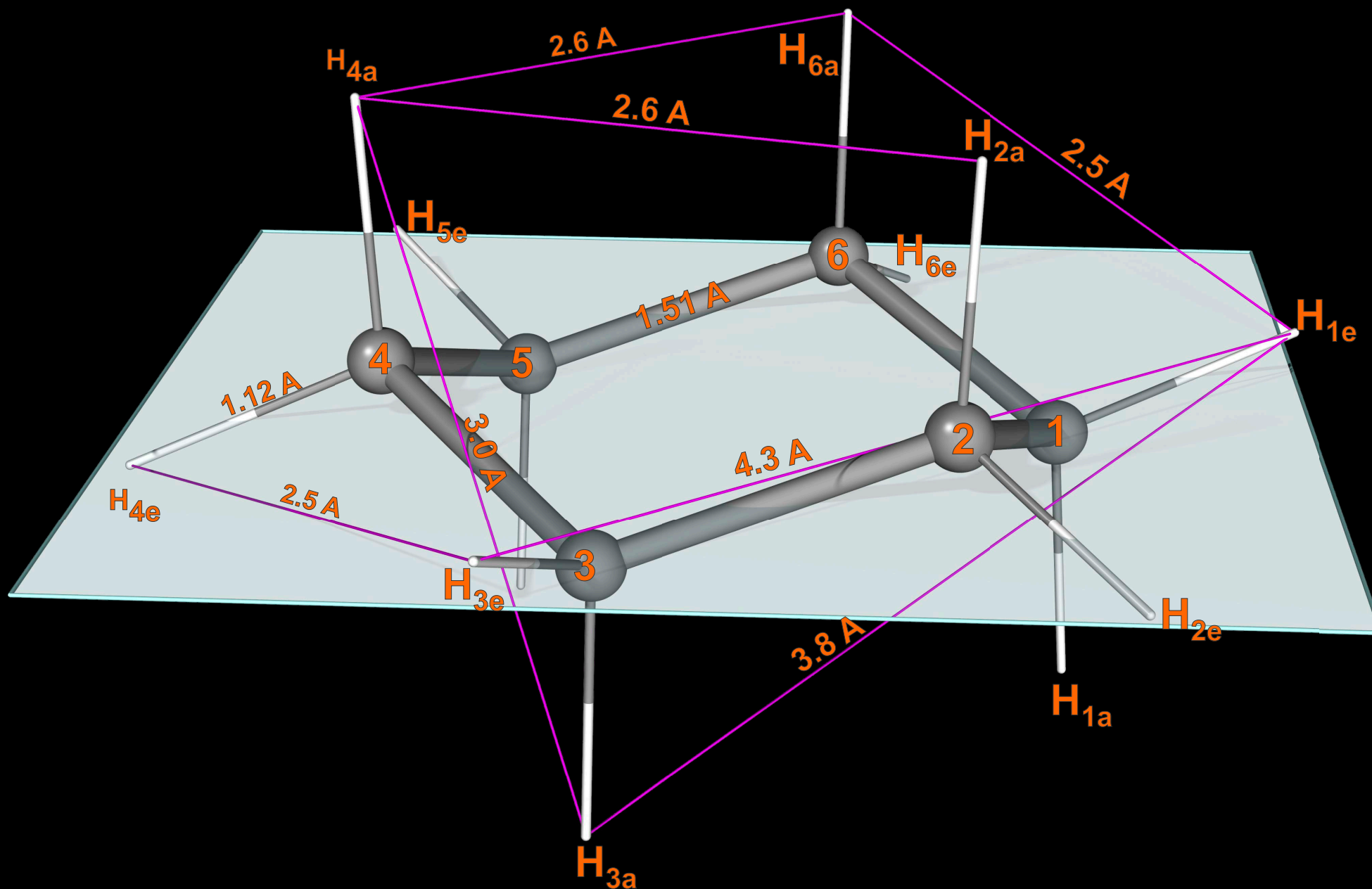
3. SVI UGLOVI KOJE ZAKLAPAJU 3 SUSEDNA ATOMA H-C-C SU $\sim 109.5^\circ$. (PRIMERI: $H_{6E}-C_6-C_1$, $H_{6A}-C_6-C_1$).

VREDNOST ($\sim \pm 62^\circ$). (PRIMER: $H_{4E}-C_4-C_5-H_{5E} = \sim -62^\circ$).

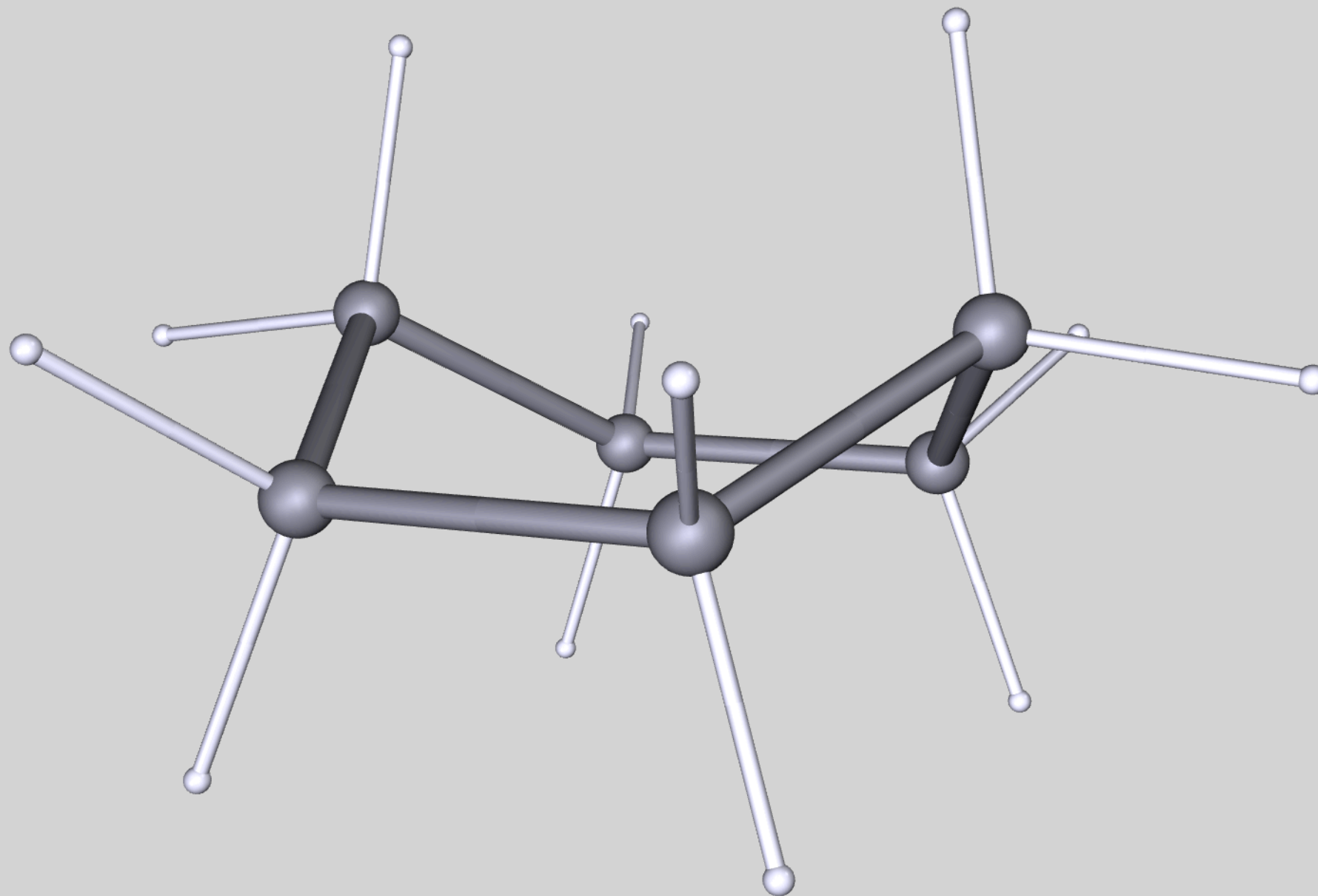
6. SVI TORZIONI UGLOVI KOJE ZAKLAPAJU 4 SUSEDNA ATOMA I TO: $H_A-C-C-H_E$ IMAJU ISTU VREDNOST ($\sim \pm 55^\circ$). (PRIMER: $H_{3A}-C_3-C_4-H_{4E} = \sim -55^\circ$).

GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE - SAMO INFORMATIVNO

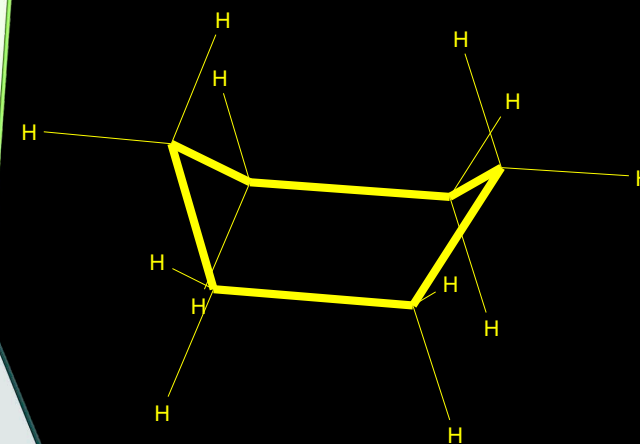
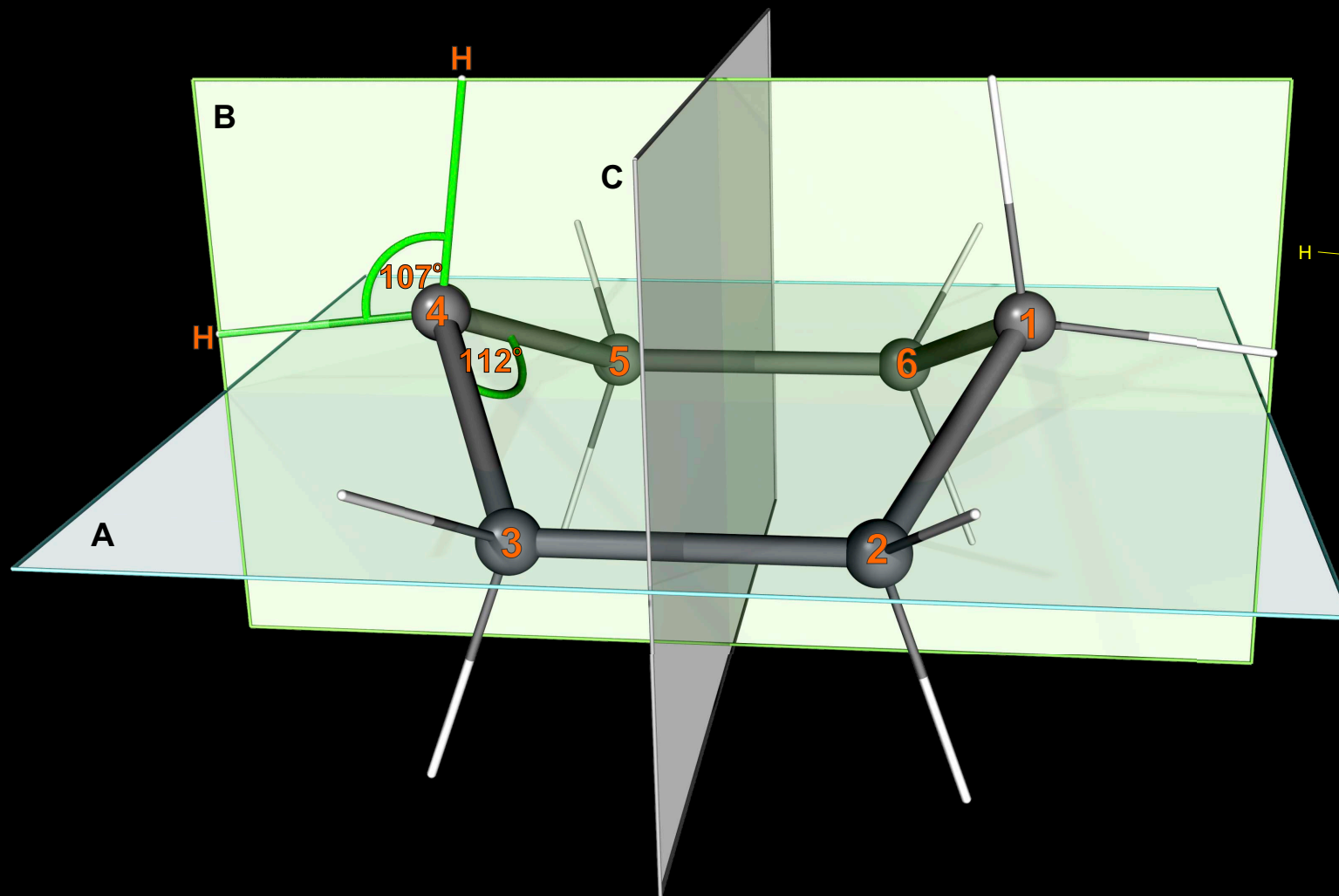
DUŽINE C-C i C-H VEZA KAO I RASTOJANJA IZMEĐU POJEDINIH H - ATOMA:



GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI LAĐE -3D MODEL



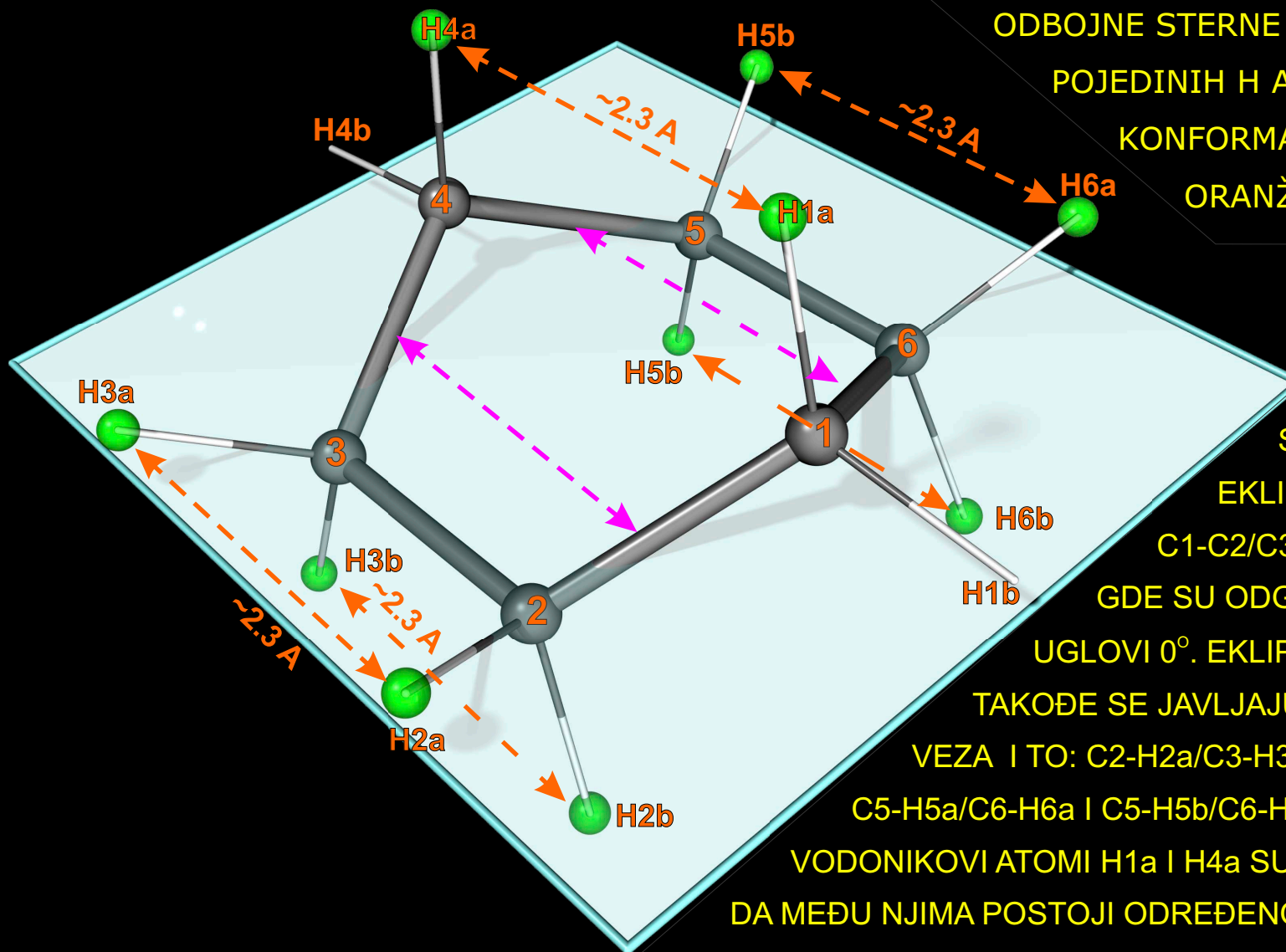
GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI LAĐE



CIKLOHEKSAN U KONFORMACIJI LAĐE
RAVAN A JE PROJEKCIONA RAVAN MOLEKULA, A
B I C SU RAVNI SIMETRIJE. ČETIRI C ATOMA LEŽE U
RAVNI A DOK JE SU ATOMI C1 I C4 IZNAD I LEŽE U

RAVNI B. UGLOVI KOJE ZAKLAPAJU TRI SUSEDNA C
ATOMA SU $\sim 112^\circ$, DOK SU UGLOVI H-C-H $\sim 107^\circ$.

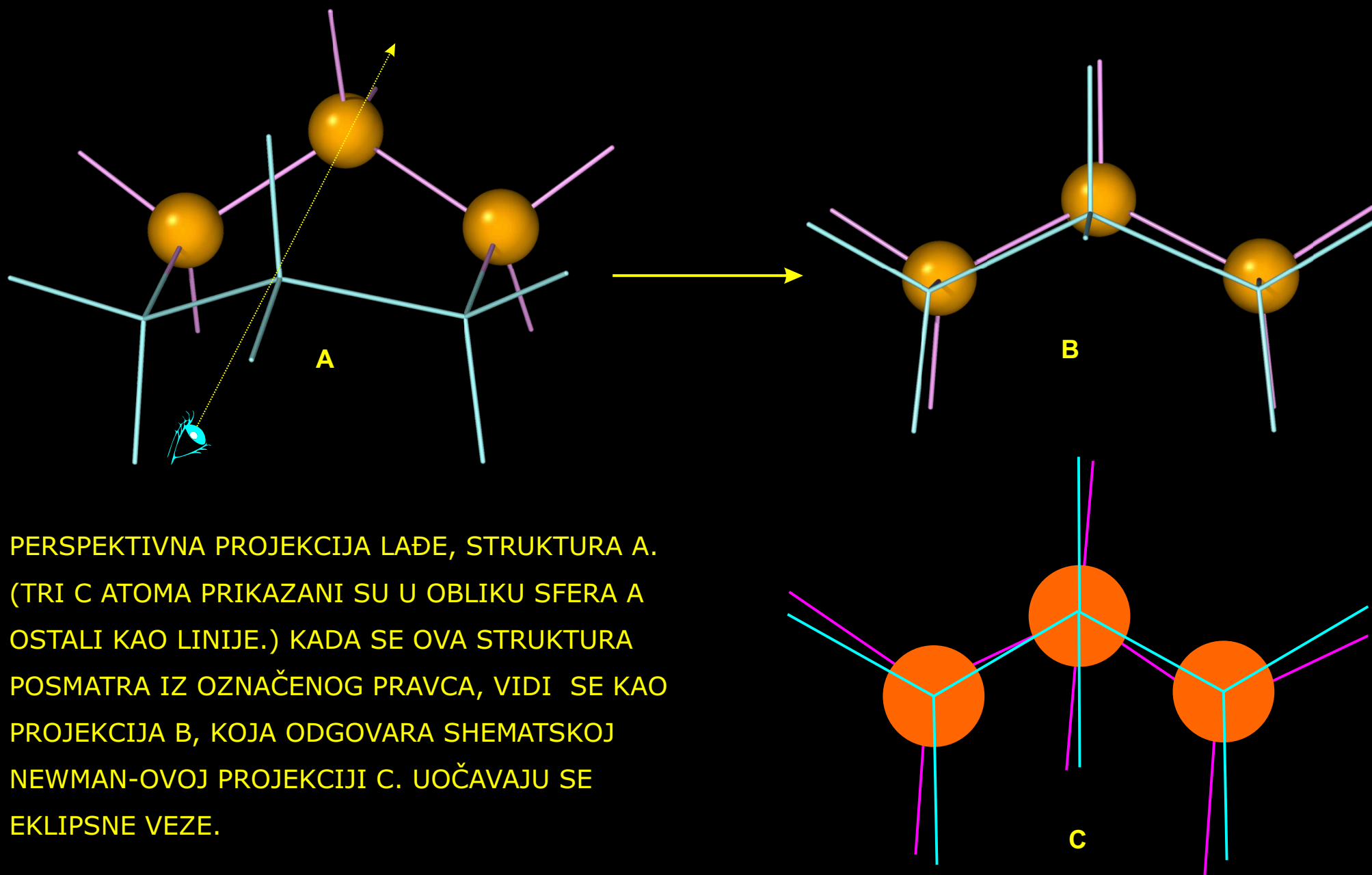
DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - KONFORMACIJA LAĐE (nastavak)



ODBOJNE STERNE INTERAKCIJE IZMEĐU POJEDINIH H ATOMA (ZELENE SFERE) U KONFORMACIJI LAĐE OZNAČENE SU ORANŽ LINIJAMA.

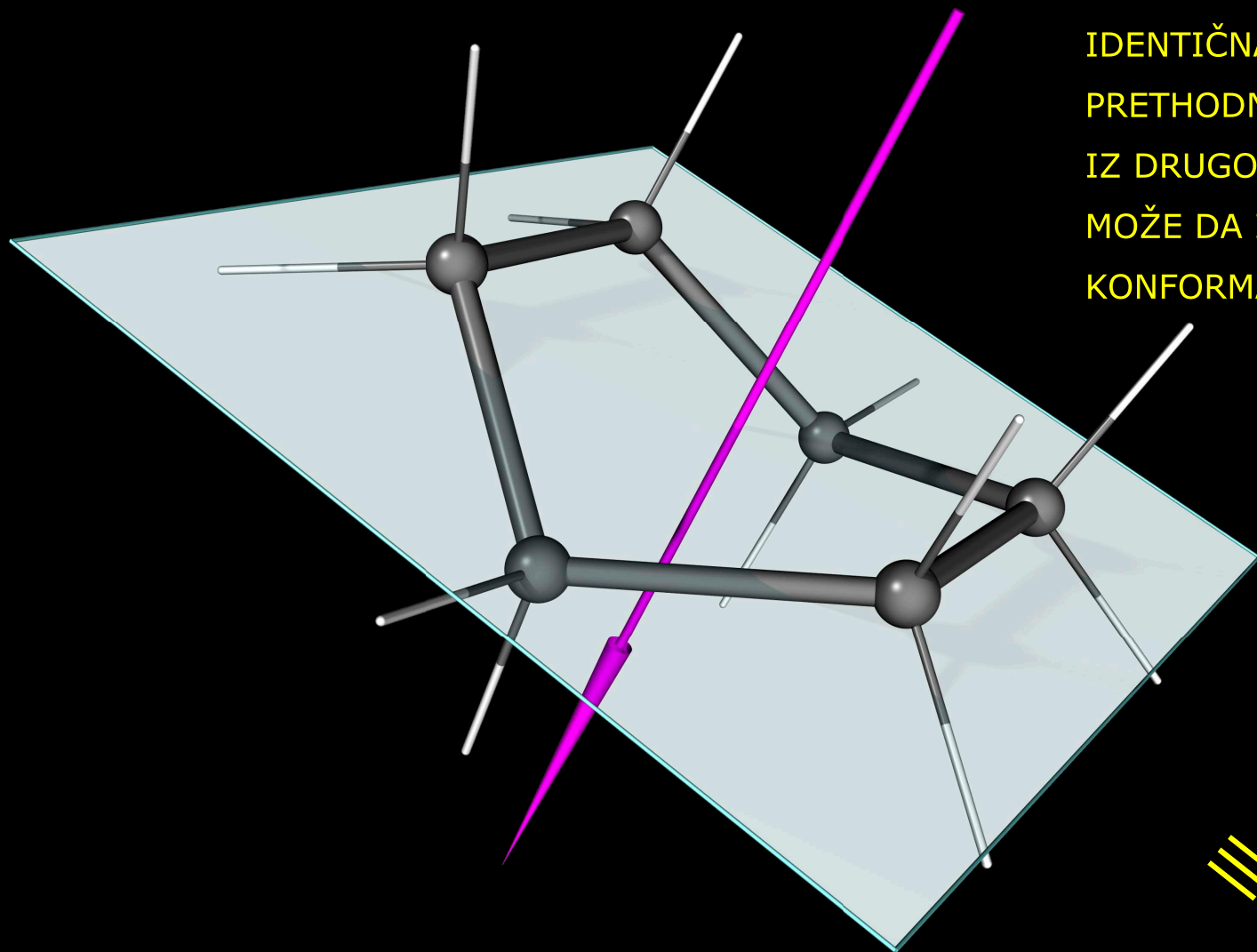
KONFORMACIJA LAĐE IMA ZNAČAJAN STERNI NAPON USLED EKLIPSNIH KONFORMACIJA VEZA C1-C2/C3-C4 I C4-C5/C6-C1 (TJ. TAMO GDE SU ODGOVARAJUĆI TORZIONI UGLOVI 0°). EKLIPSNE KONFORMACIJE TAKOĐE SE JAVLJAJU I KOD POJEDINIH C-H VEZA I TO: C2-H2a/C3-H3a, C2-H2b/C3-H3b, C5-H5a/C6-H6a I C5-H5b/C6-H6b. PORED TOGA, VODONIKOVI ATOMI H1a I H4a SU PROSTORNO BLISKI TAKO DA MEĐU NJIMA POSTOJI ODREĐENO STERNO ODBIJANJE. SVI OVI FAKTORI DOPRINOSE DA JE KONFORMACIJA LAĐE ZNATNO MANJE STABILNA OD KONFORMACIJE STOLICE.

DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - KONFORMACIJA LAĐE (nastavak)

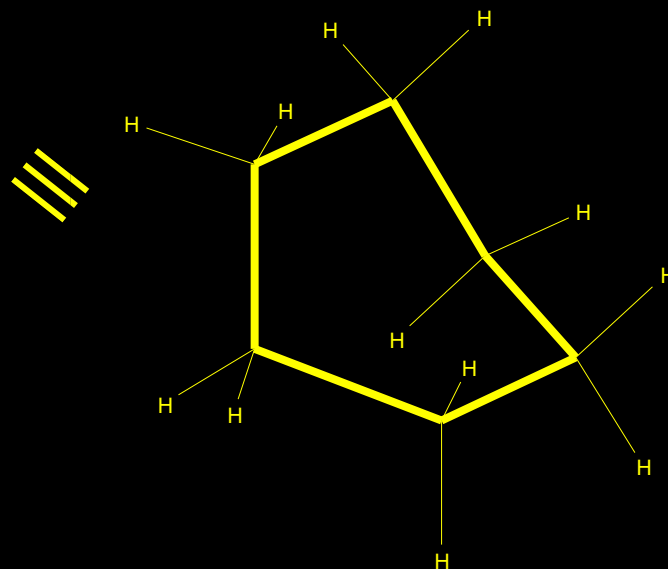


PERSPEKTIVNA PROJEKCIJA LAĐE, STRUKTURA A.
(TRI C ATOMA PRIKAZANI SU U OBLIKU SFERA A
OSTALI KAO LINIJE.) KADA SE OVA STRUKTURA
POSMATRA IZ OZNAČENOG PRAVCA, VIDI SE KAO
PROJEKCIJA B, KOJA ODGOVARA SHEMATSKOJ
NEWMAN-OVOJ PROJEKCIJI C. UOČAVAJU SE
EKLIPSNE VEZE.

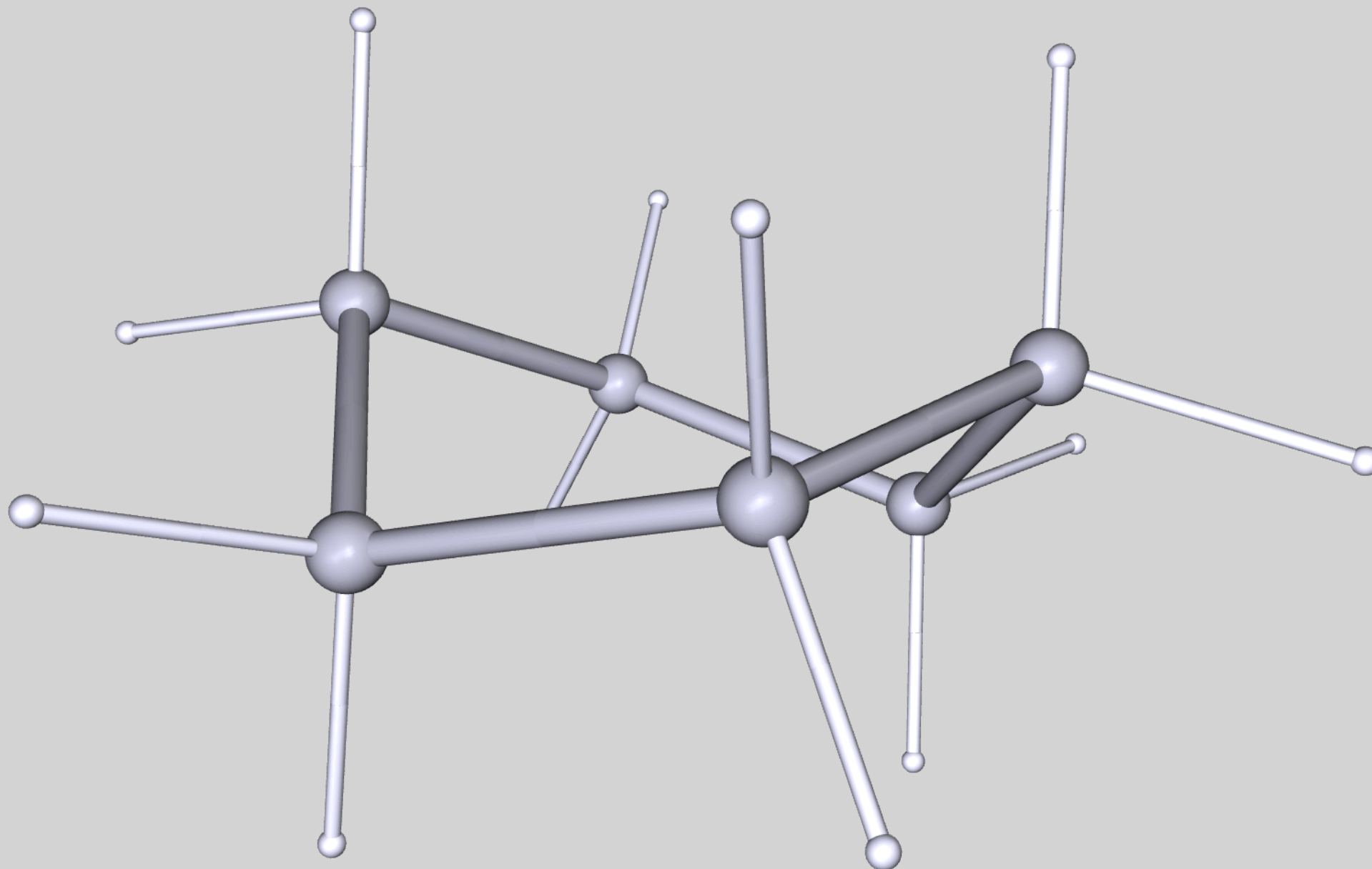
DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - KONFORMACIJA LAĐE (nastavak)



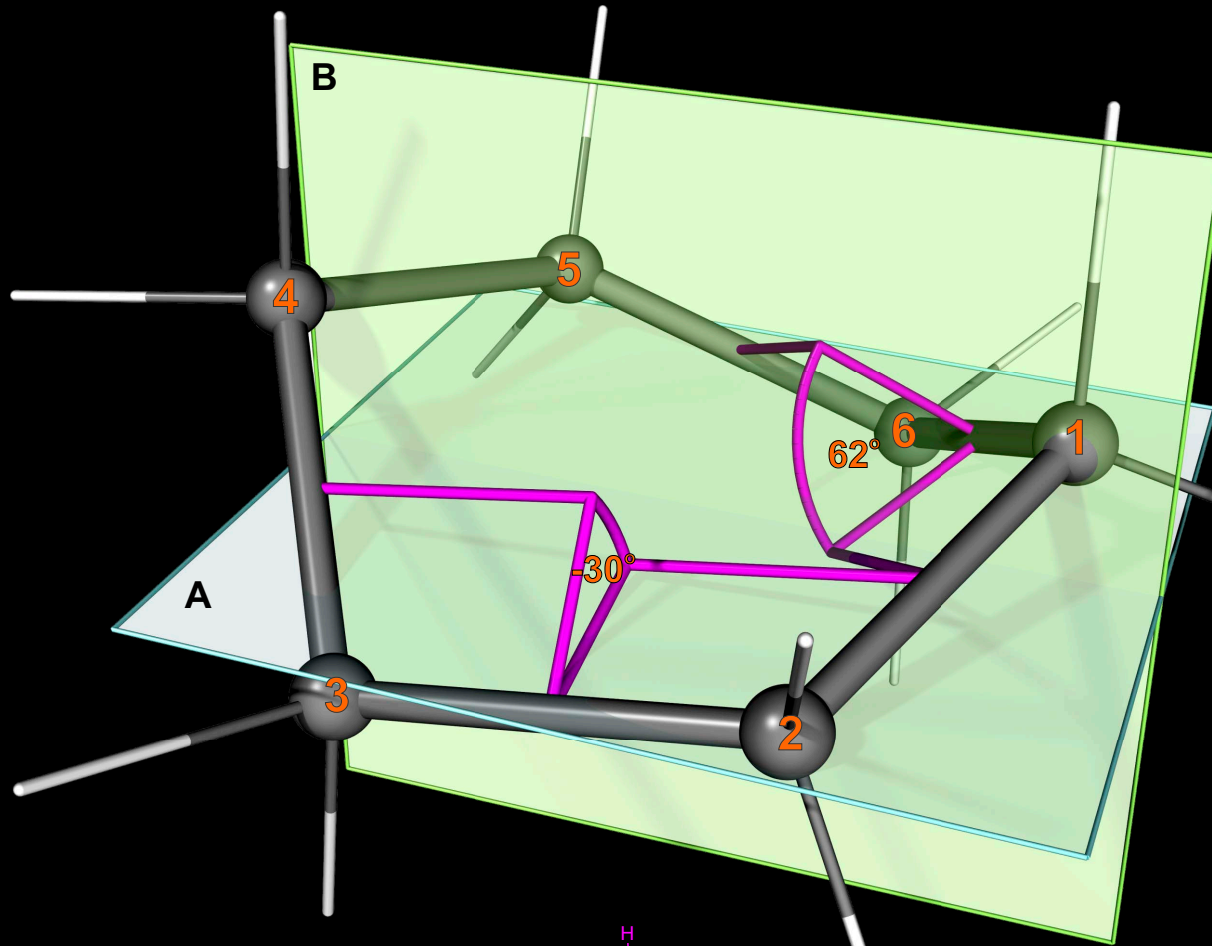
IDENTIČNA KONFORMACIJA LAĐE KAO NA PRETHODNIM SLIKAMA, ALI PRIKAZANA IZ DRUGOG UGLA. NA PRVI POGLED, MOŽE DA IZGLEDA KAO DRUGAČIJA KONFORMACIJA.



GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI UVIJENE LAĐE - 3D MODEL



DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - UVIJENA LAĐA



CIKLOHEKSAN U KONFORMACIJI
UVIJENE LAĐE.

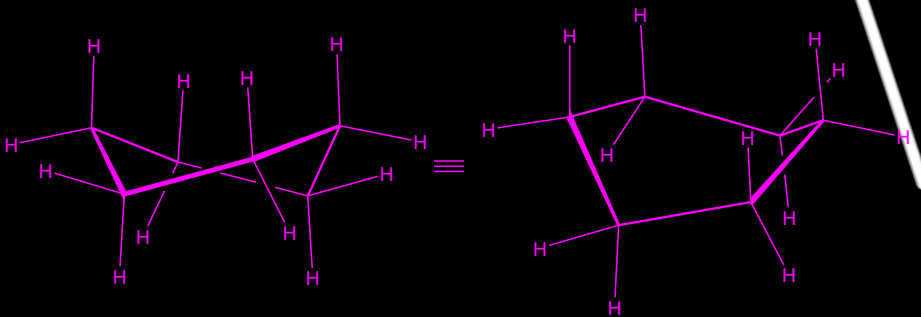
TORZION I UGLOVI KOJI DEFINIŠU
OVAJ KONFORMER Približno iznose :

1. $C_1-C_2-C_3-C_4$ -30° ;
2. $C_2-C_3-C_4-C_5$ 62° ;
3. $C_3-C_4-C_5-C_6$ -30° ;
4. $C_4-C_5-C_6-C_1$ -30°
5. $C_5-C_6-C_1-C_2$ 62° i
6. $C_6-C_1-C_2-C_3$ -30°

KONFORMACIJA UVIJENE LAĐE NEMA
ELEMENTA SIMETRIJE I HIRALNA JE.

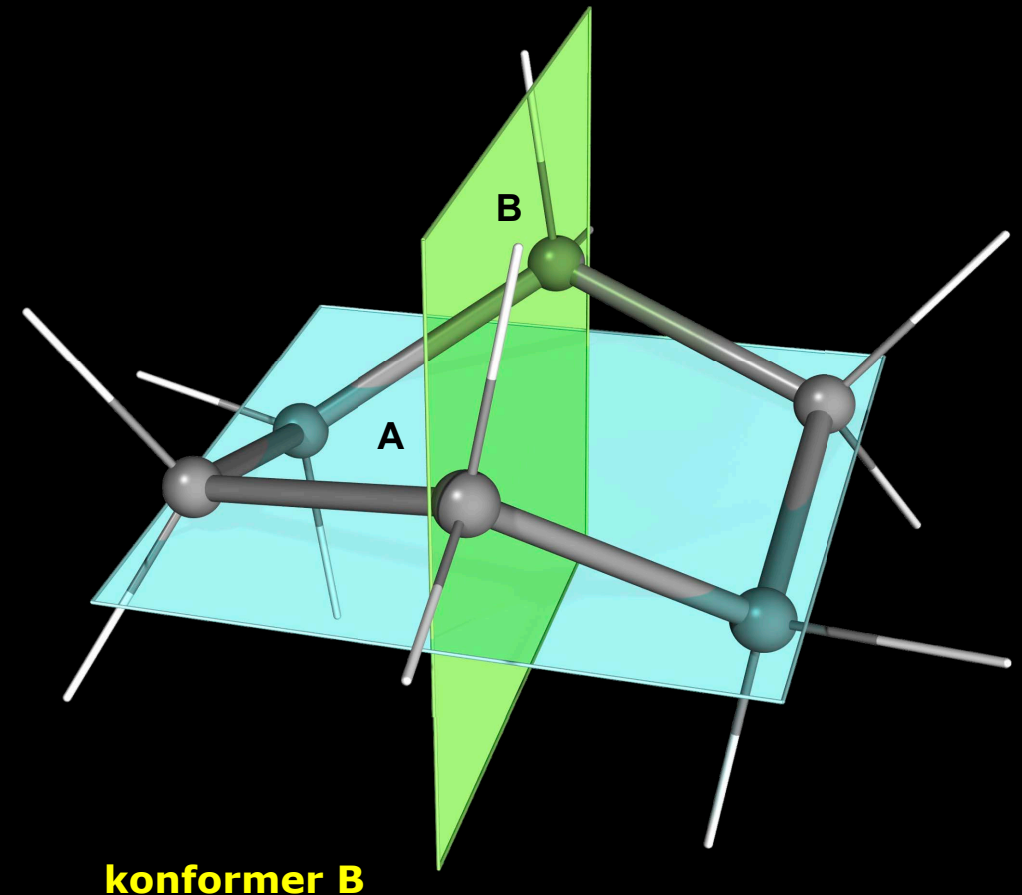
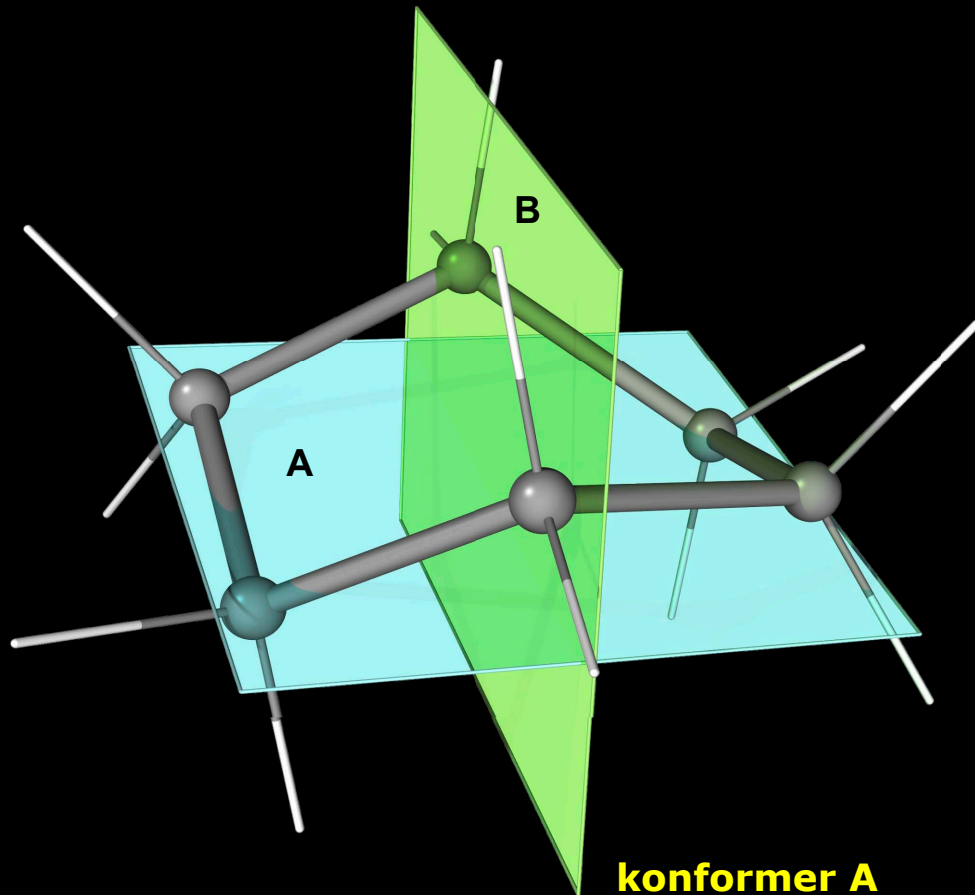
PRIKAZANE RAVNI A I B NISU RAVNI
SIMETRIJE VEĆ PRETSTAVLJAJU PROJEKCIJE
RAVNI MOLEKULA.

IAKO KONFORMACIJA UVIJENE LAĐE JOŠ
UVEK IMA ZNAČAJAN STERNI NAPON, NEŠTO JE
STABILNIJA OD KONFORMACIJE LAĐE JER NEMA
VEZA KOJE SU U EKLIPSOM POLOŽAJU.



Približna konformaciona
energija je 5.5 kcal/mol

DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - UVIJENA LAĐA (nastavak)

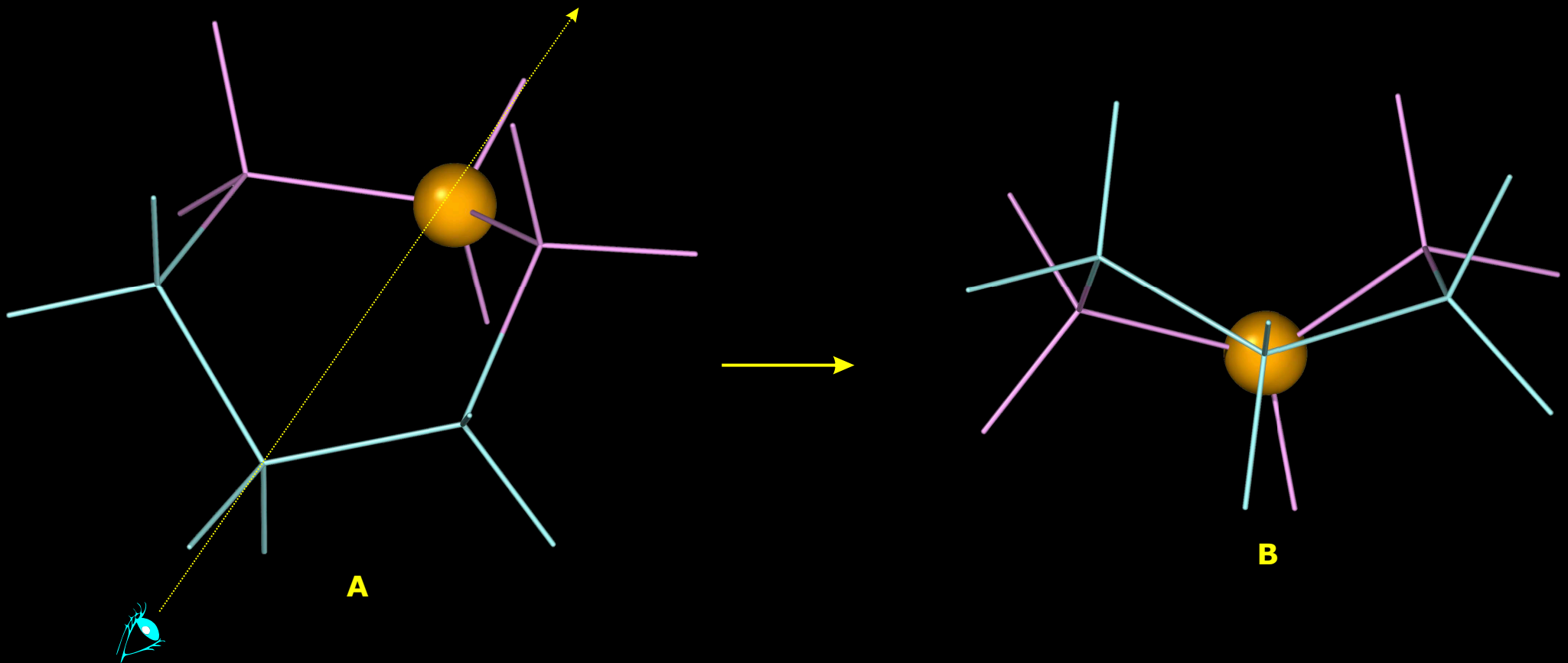


POŠTO JE KONFORMACIJA UVRNUTE LAĐE
HIRALNA, ONA MOŽE POSTOJATI U OBLIKU DVA
KONFORMACIONA ENANTIOMERA
(KONFORMACIONI ENANTIOMERI SE NE MOGU
RAZDVOJITI JER, ZBOG VEOMA MALE
ENERGETSKE BARIJERE, BRZO PRELAZE JEDAN U

DRUGI KAO I U DRUGE KONFORMERE).

KONFORMACIONI ENANTIOMER A IMA
STRUKTURU SUPROTNU OD ONOG PRIKAZANOG
NA PRETHODNOJ STRANI (STRUKTURA B) I
DEFINISAN JE TORZIONIM UGLOVIMA
SUPROTNOG PREDZNAKA).

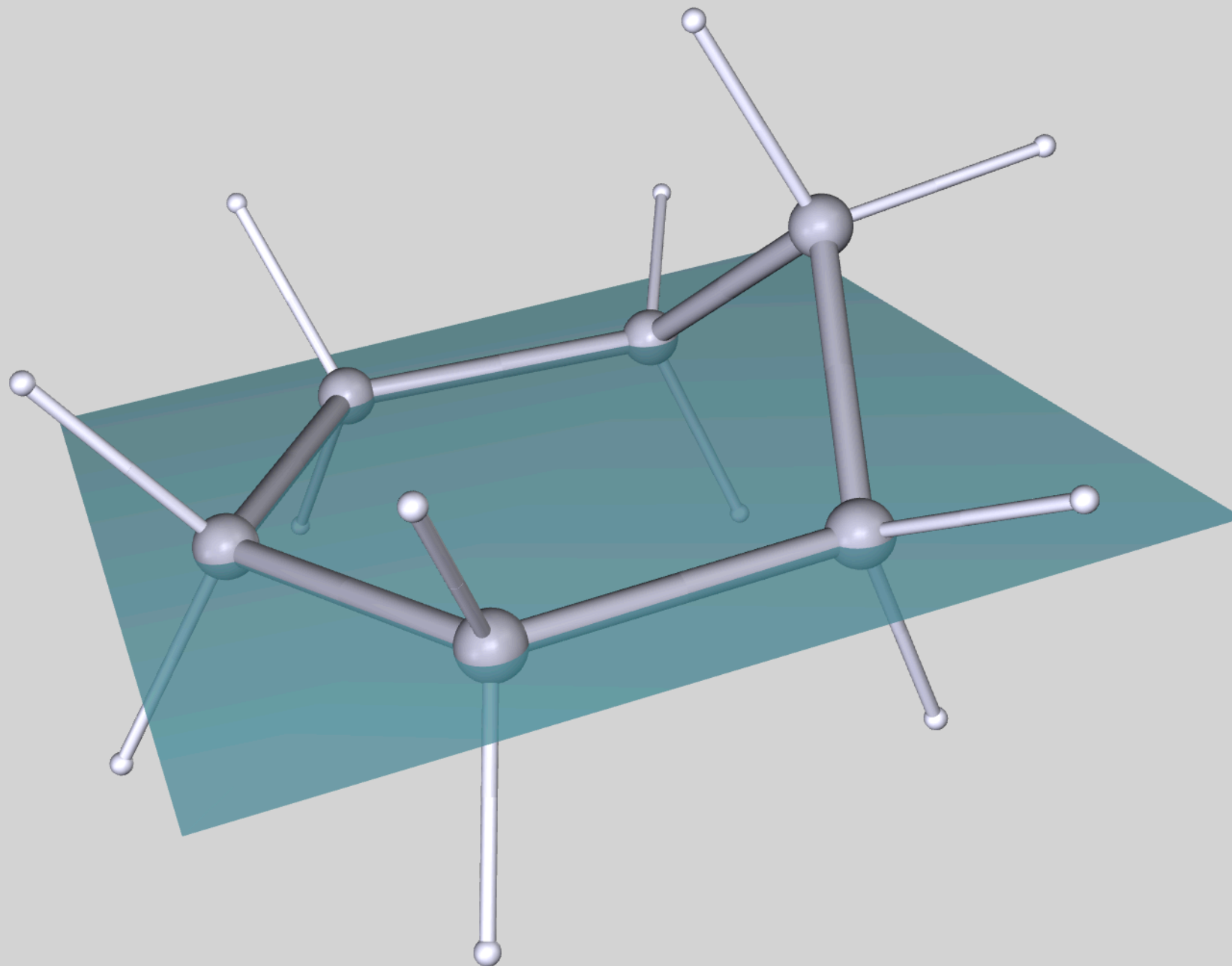
DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - UVIJENA LAĐA (nastavak)



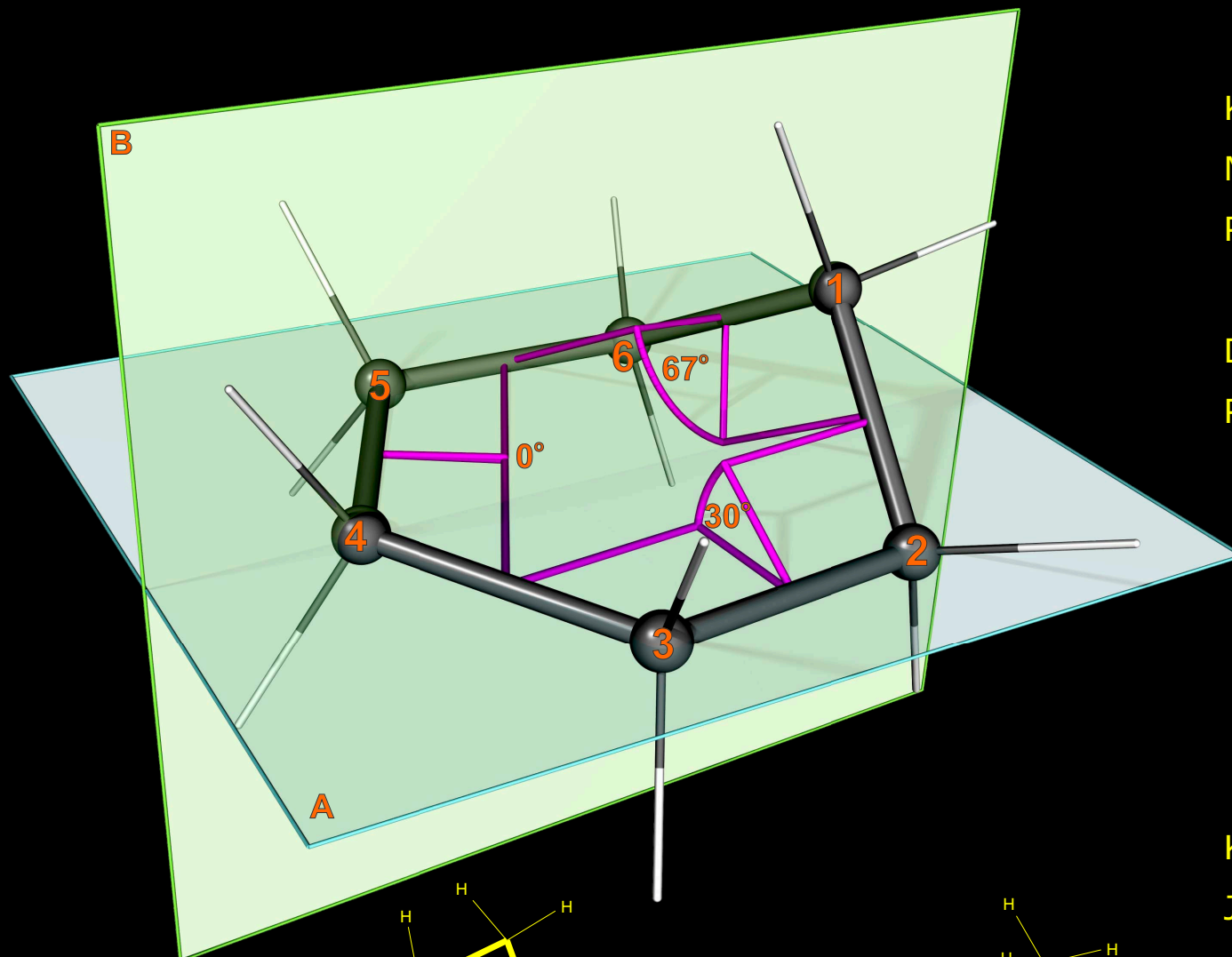
PERSPEKTIVNA PROJEKCIJA UVIJENE LAĐE, STRUKTURA A.. (JEDAN C ATOM PRIKAZAN JE U OBLIKU SFERE A OSTALI KAO LINIJE.) KADA SE OVA STRUKTURA POSMATRA IZ OZNAČENOG

PRAVCA, VIDI SE KAO PROJEKCIJA B, KOJA ODGOVARA NEWMAN-OVOJ PROJEKCIJI. UOČAVAJU SE KOSE ORIJENTACIJE VEZA.

DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - POLUSTOLICA -3D MODEL



DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - POLUSTOLICA

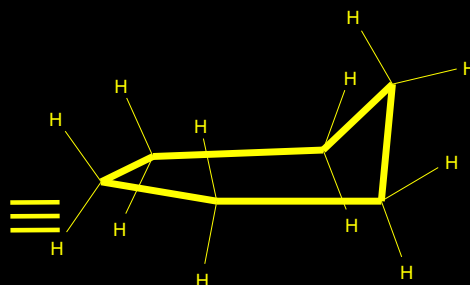
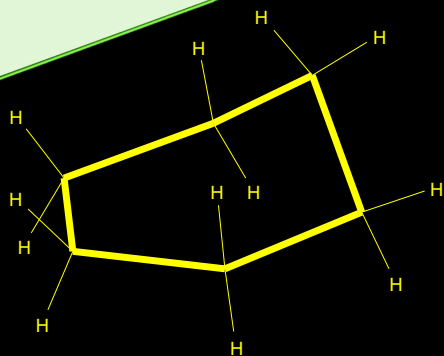


CIKLOHEKSAN U
KONFORMACIJI POLUSTOLICE
MOŽE SE POSMATRATI KAO "POLU-
PLANARNI" CIKLOHEKSAN.

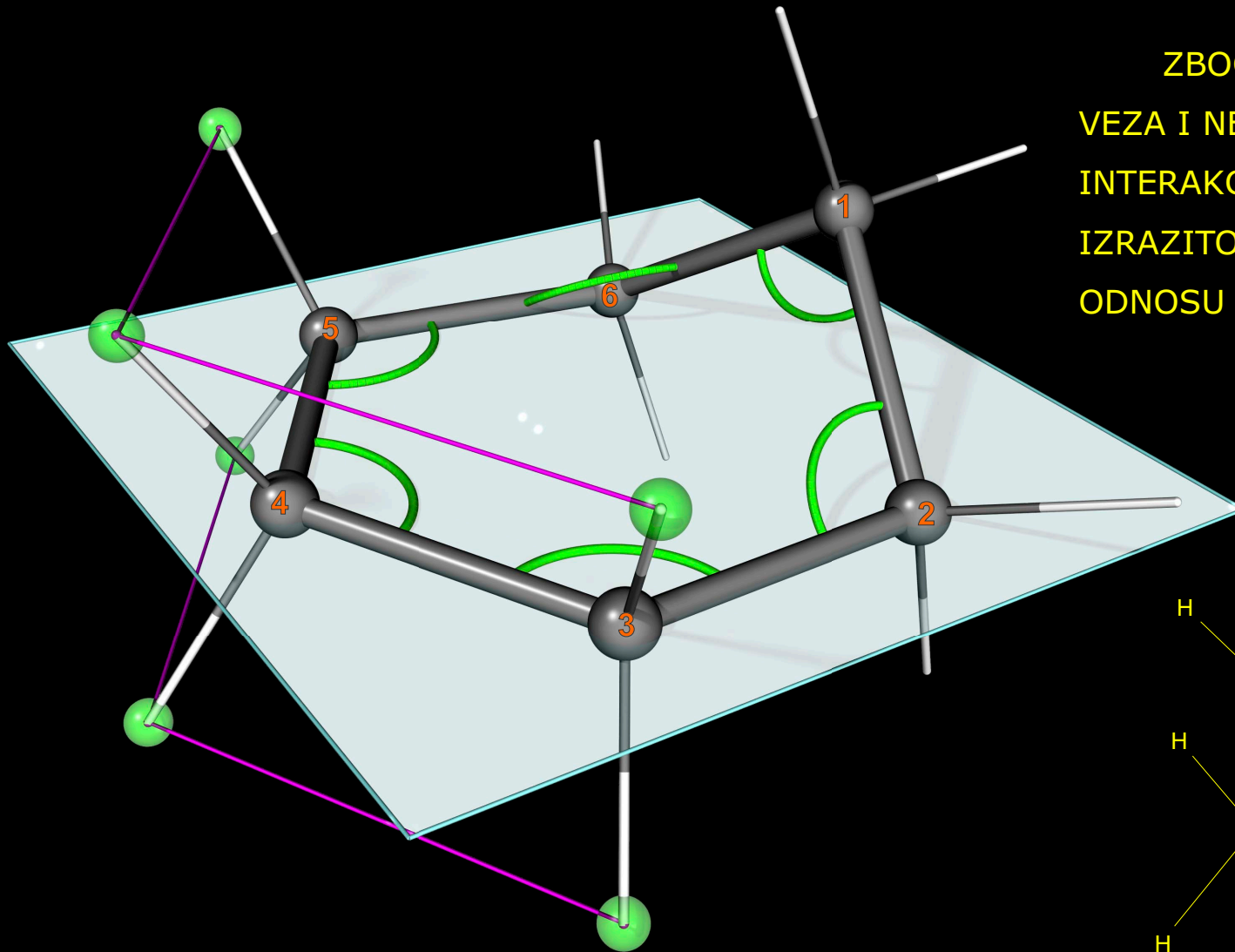
TORZIONI UGLOVI KOJI
DEFINIŠU OVAJ KONFORMER
PRIBLIŽNO IZNOSE :

1. $C_1-C_2-C_3-C_4 \sim 30^\circ$;
2. $C_2-C_3-C_4-C_5 \sim 0^\circ$;
3. $C_3-C_4-C_5-C_6 \sim 0^\circ$;
4. $C_4-C_5-C_6-C_1 \sim -30^\circ$
5. $C_5-C_6-C_1-C_2 \sim 67^\circ$ i
6. $C_6-C_1-C_2-C_3 \sim -67^\circ$

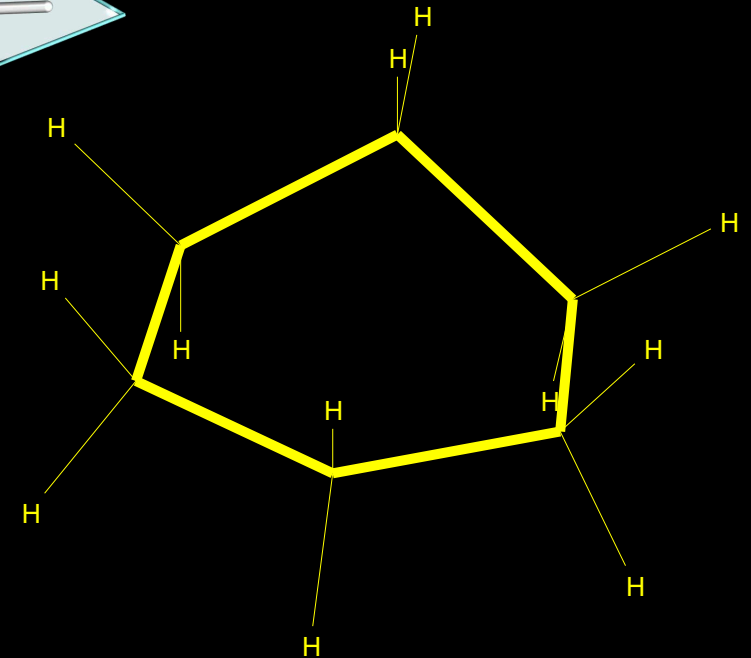
KONFORMACIJA POLUSTOLICE IMA
JEDNU RAVAN SIMETRIJE (B).



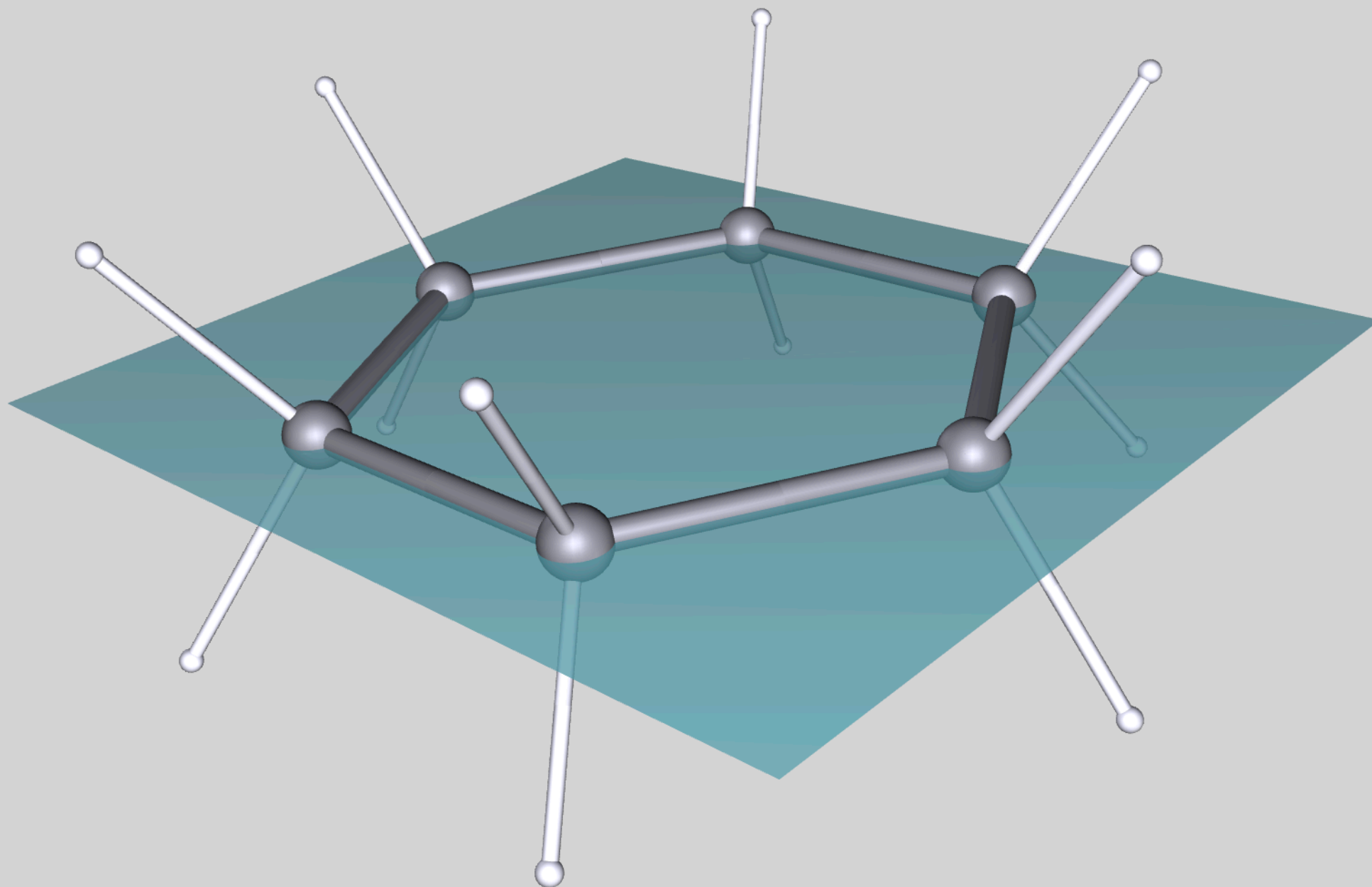
DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - POLUSTOLICA



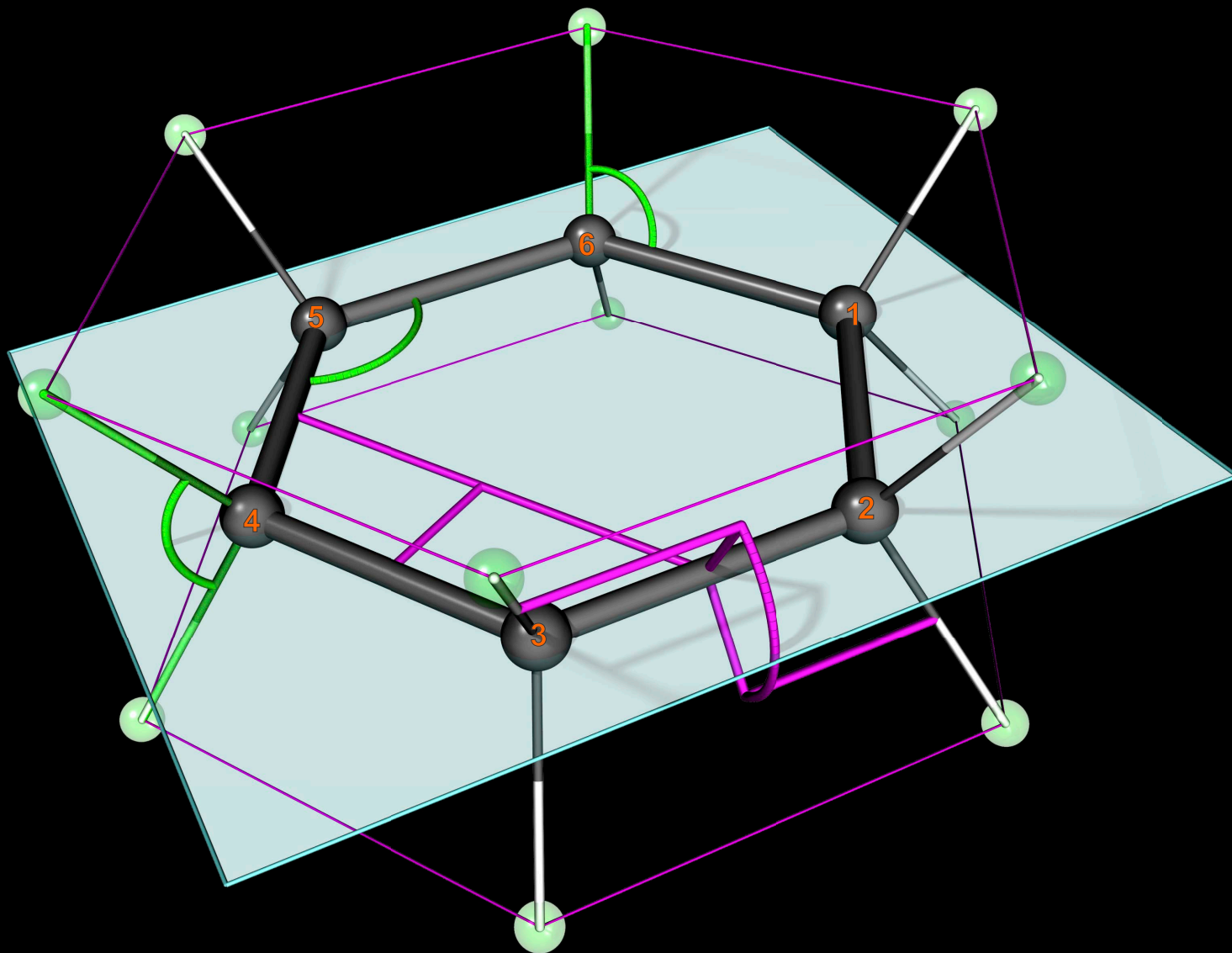
ZBOG VELIKIH DEFORMACIJA UGLOVA VEZA I NEPOVOLJNIH EKLIPSNIH INTERAKCIJA, OVA KONFORMACIJA JE IZRAZITO NESTABILNA, (~ 10.8 kcal/mol) U ODNOSU NA KONFORMACIJU STOLICE.



DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - PLANARNI CIKLOHEKSAN -3D MODEL



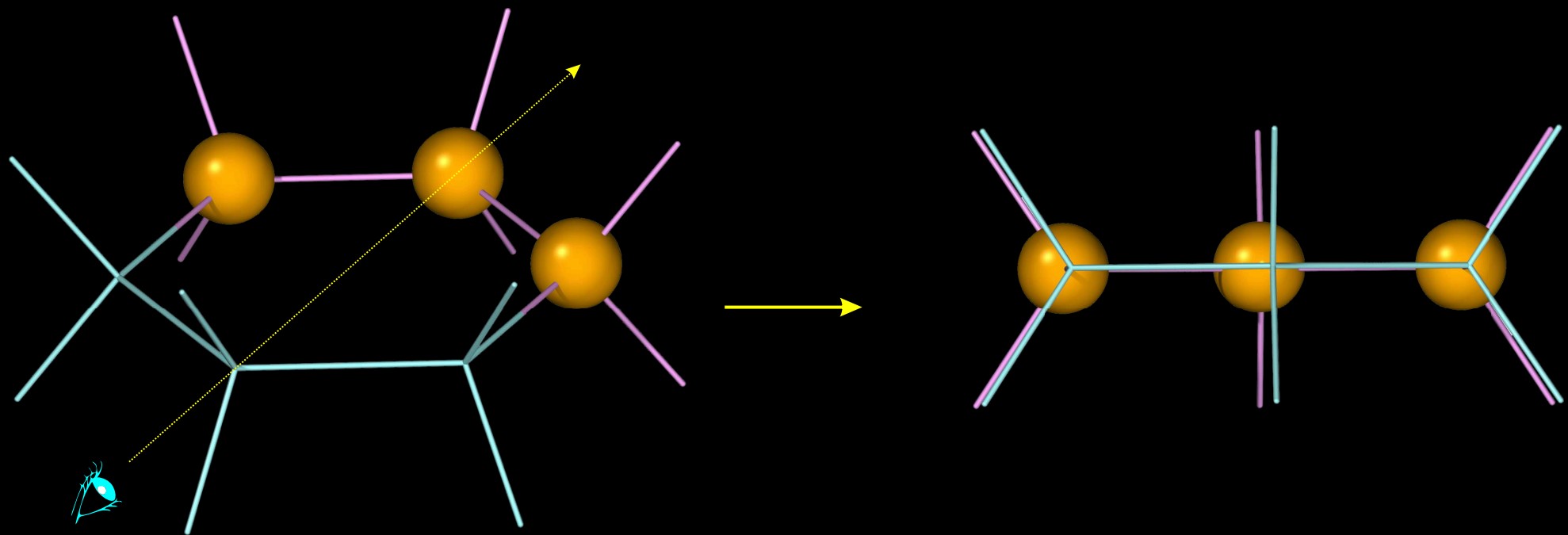
DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - PLANARNI CIKLOHEKSAN



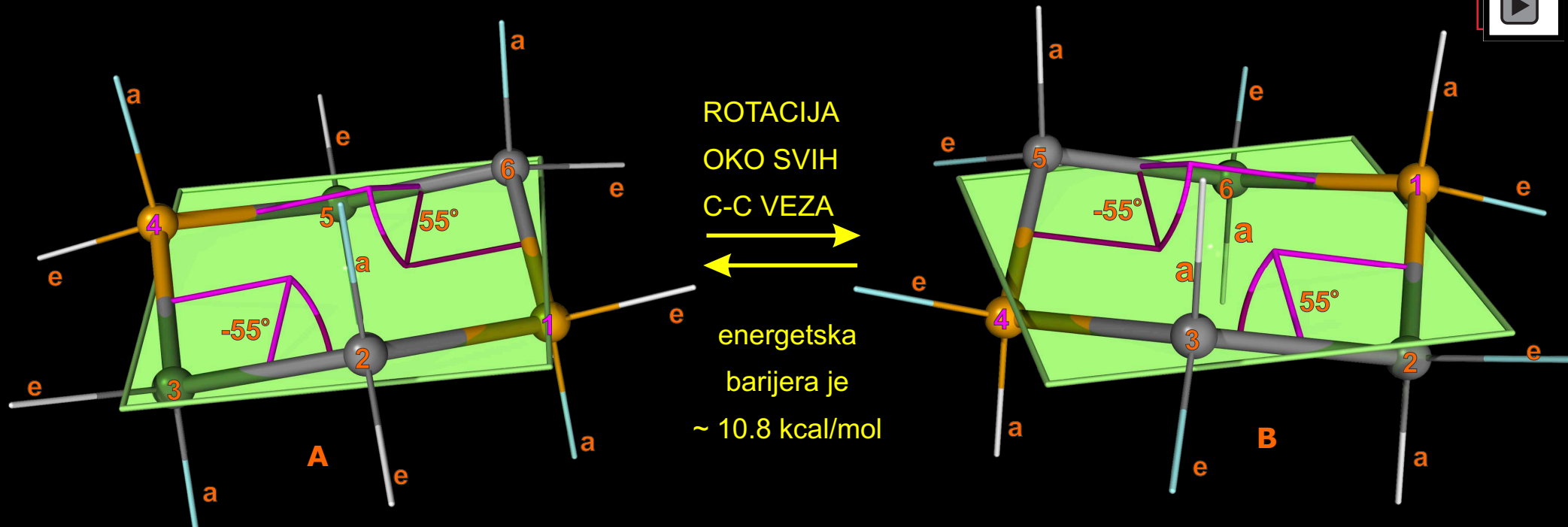
ZBOG VELIKIH
DEFORMACIJA SVIH UGLOVA
VEZA I NEPOVOLJNIH
EKLIPSNIH INTERAKCIJA SVIH
VEZA, OVA KONFORMACIJA JE
NAJNESTABILNIJA
KONFORMACIJA CIKLOHEKSANA
, ($\gg 10.8$ kcal/mol) U ODNOSU
NA KONFORMACIJU STOLICE.

DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - PLANARNI CIKLOHEKSAN

(NEWMAN-ove PROJEKCIJE STRUKTURE)



DINAMIČKA RAVNOTEŽA RAZLIČITIH KONFORMERA CIKLOHEKSANA



Dve konformacije stolice cikloheksana kontinualno prelaze jedna u drugu slobodnom rotacijom oko C-C veza. Između ove dve konformacije nalazi se neograničeni broj drugih konformacija koje su energetske manje povoljne (imaju viši sadržaj energije), ali na $\sim 20^\circ\text{C}$ molekul cikloheksana ima dovoljno energije za oko 100 000 inverzija ("flipovanja") u sekundi.

Dve prikazane konformacije stolice su potpuno ekvivalentne i ne mogu se međusobno razlikovati na molekulskom nivou, ukoliko su svi supstituenti isti (H atomi ili npr. halogeni). Isključivo radi razlikovanja, aksijalni H atomi su obeleženi svetlo plavom bojom a ekvatorijalni

belom, dok su atomi C_1 i C_4 oranž, struktura A. Tokom inverzije, svi aksijalni H atomi postaju ekvatorijalni i obrnuto. Takođe, svi C atomi menaju svoj relativni položaj u odnosu projekcionu ravan molekula - oni koji su u strukturi A bili iznad projekcione ravni (C_2 , C_4 i C_6) u strukturi B su ispod projekcione ravni i obrnuto. Takođe, svi torzioni uglovi menjaju predznak. (Na SI su prikazana samo dva torziona ugla i to $C_1-C_2-C_3-C_4$ i $C_4-C_5-C_6-C_1$). Ovde se još jedno naglašava da pri prelasku jednog konformera u drugi nikako ne dolazi do raskidanja C-C veza već samo do rotacije oko tih veza.

RELATIVNA VOLUMINOZNOST JEDNOSTAVNIH SUPSTITUENATA

1. ALKIL GRUPE

1.1 LINEARNE ALKIL GRUPE: $\text{CH}_3 < \text{CH}_3\text{CH}_2 < \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2$ itd.

1.2. LINEARNE I RAČVASTE: $\text{CH}_3 < \text{CH}_3\text{CH}_2 < \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2 < \text{izo-PROPIL} < \text{terc-BUTIL}$

2. HALOGENI

$\text{F} < \text{Cl} < \text{Br} < \text{I}$

3. OSTALE GRUPE KOJE SADRŽE 1 ATOM (VELIČINA ODGOVARA POLOŽAJU U DATOJ GRUPI PERIODNOG SISTEMA), KAO npr.:

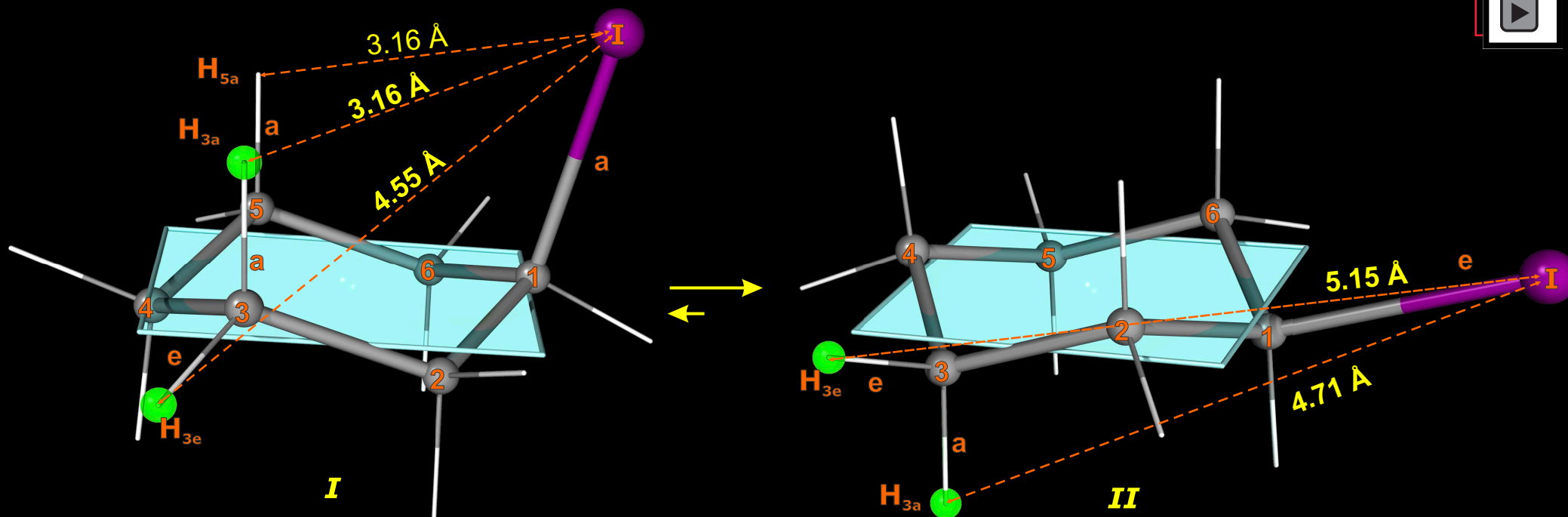
$\text{N} < \text{P} < \text{As}$

$\text{O} < \text{S} < \text{Se}$

4. SLOŽENE GRUPE: ALKENIL, ALKINIL, ARIL, ALKOKSI itd.: VOLUMINOZNOST SE MORA PRORAČUNATI I/ILI EKSPERIMENTALNO ODREDITI.

5. I MNOGI DRUGI FAKTORI (PORED VOLUMINOZNOSTI) SU BITNI ZA KONFORMACIONU ANALIZU: MOGUĆNOST FORMIRANJA VODONIČNIH VEZA, DIPOL-DIPOL INTERAKCIJE itd.

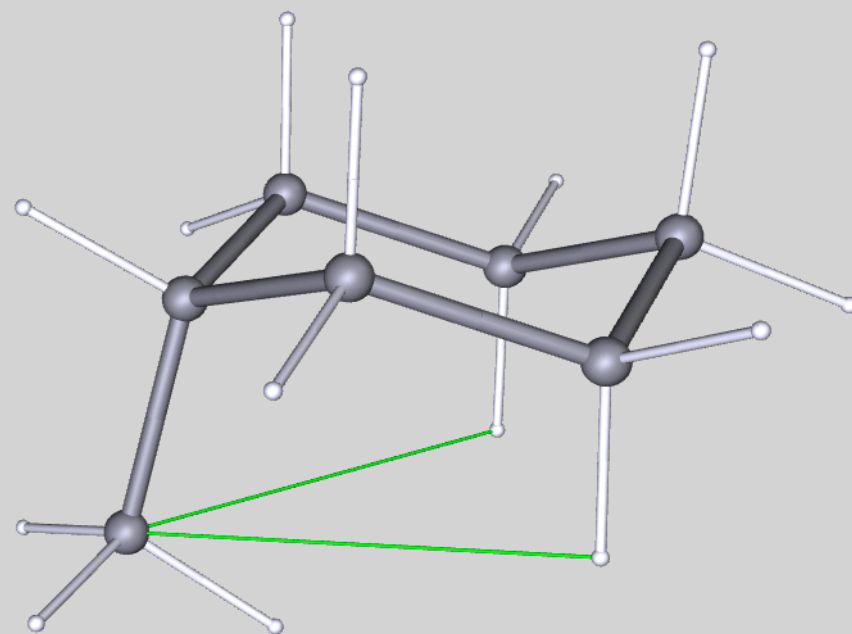
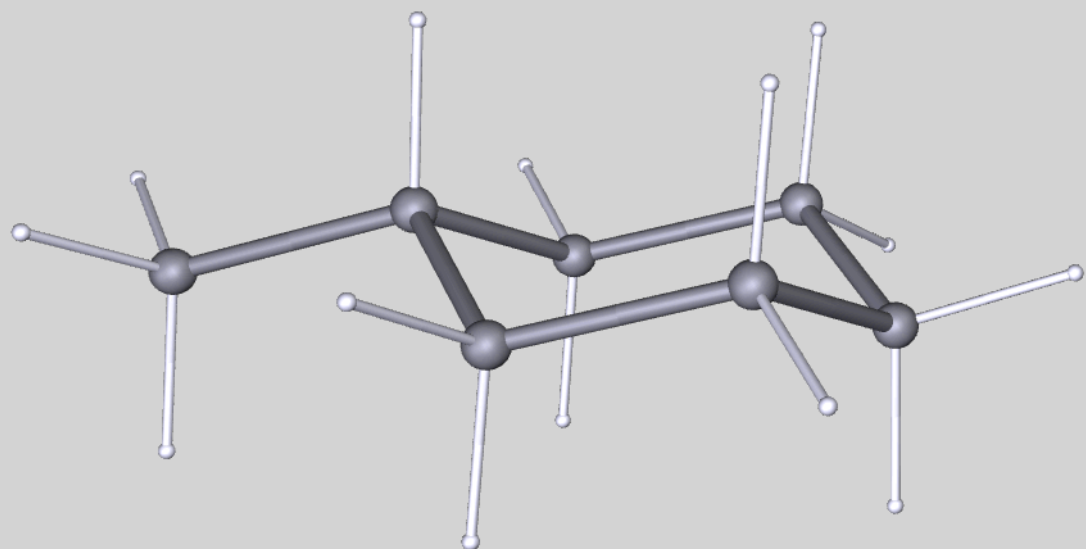
KONFORMACIJE SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA



Kod supstituisanih cikloheksana, dve konformacije stolice više nemaju istu energiju, kao što je to prikazano na primeru jod-cikloheksana. Kod aksijalnog konformera, struktura *I*, atom joda je relativno blizak atomima H_{3a} i H_{5a} , što dovodi do međusobnog odbijanja i destabilizacije konformera. (Atomi H_{3a} i H_{5a} su obeleženi zelenim sferama). Ovakve interakcije generalno se označavaju kao 1,3- interakcije i karakteristične su za aksijalni konformer. Kod ekvatorijalnog konformera,

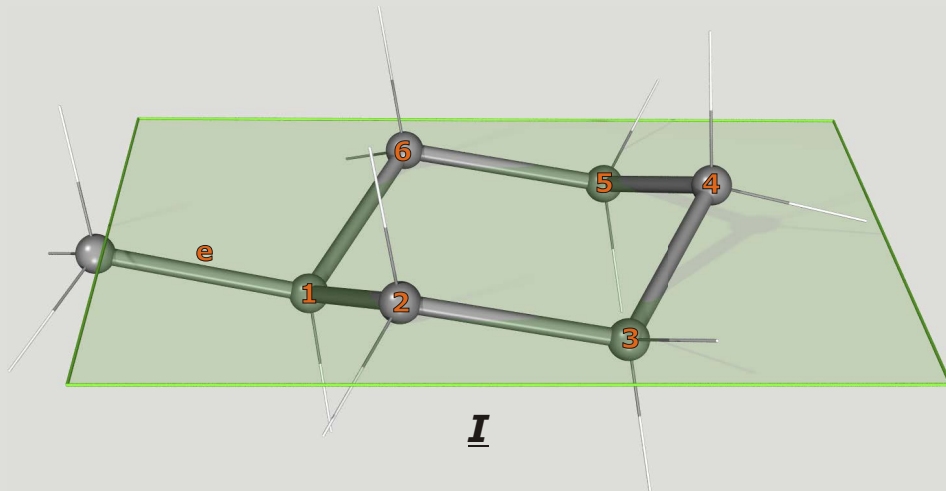
struktura *II*, 1,3- interakcije nisu prisutne, jer su rastojanja između istih atoma daleko veća. Stoga je opšte pravilo da su aksijalni konformeri manje stabilni od ekvatorijalnih. U konkretnom primeru, ekvatorijalni konformer je stabilniji od aksijalnog za ~ 0.46 kcal/mol. Konsekventno, u dinamičkoj ravnoteži dva konformera, više je zastupljen ekvatorijalni. (Sva navedena rastojanja, kao i geometrija konformera u celini, su približni.)

KONFORMACIJE SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA METILCIKLOHEKSAN - 3D MODEL

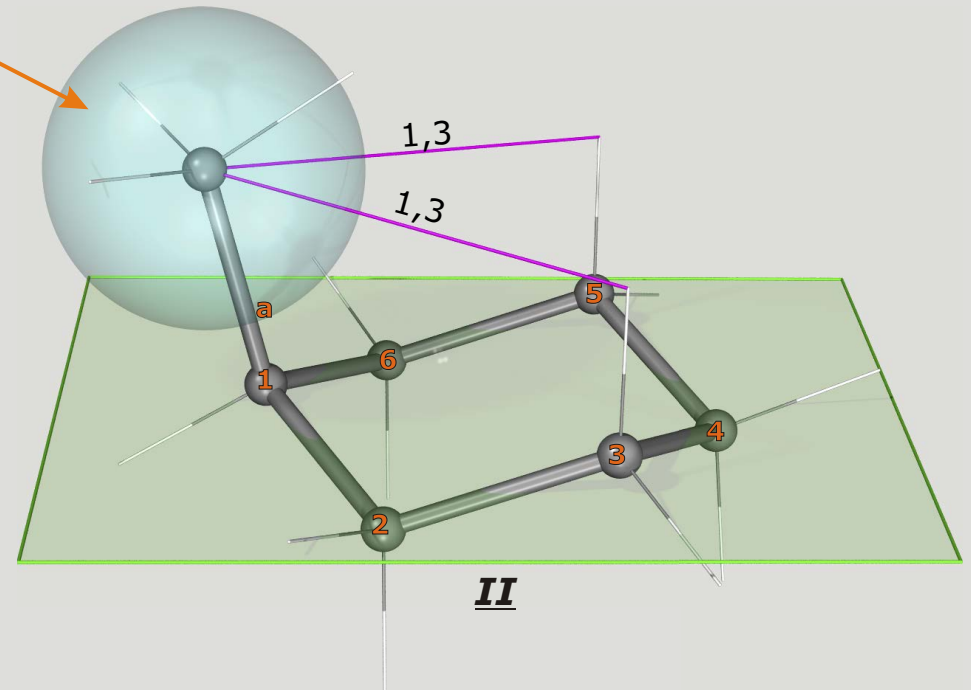


KONFORMACIJE SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - METILCIKLOHEKSAN

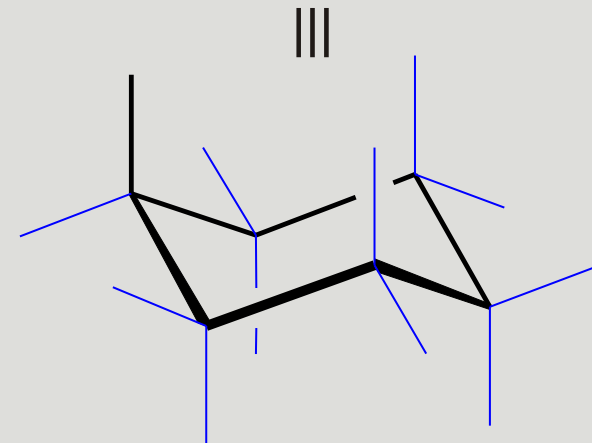
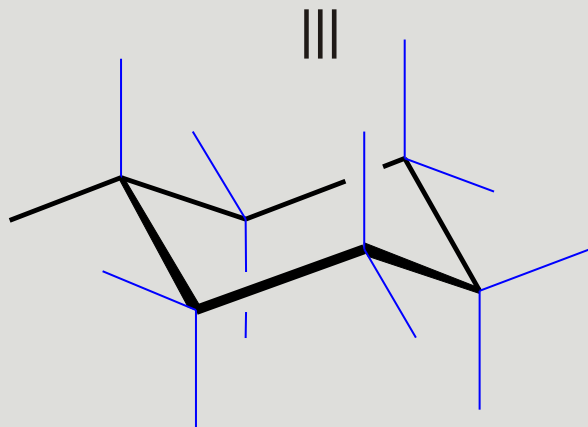
VOLUMINOZNOST
(ZAPREMINA) CH₃ GRUPE



I
EKVATORIJALNI KONFORMER, STABILNIJI
JE OD AKSIJALNOG ZA ~ 1.70 kcal/mol JER
NEMA 1,3-ODBOJNIH INTERAKCIJA

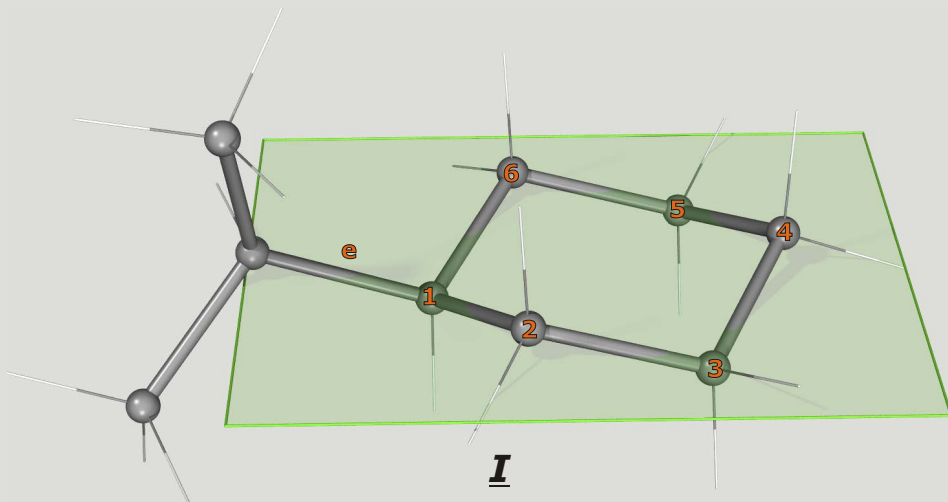


II
AKSIJALNI KONFORMER, NE-STABILNIJI
JE OD EKVATORIJALNOG ZA ~ 1.70 kcal/mol
ZBOG 1,3-ODBOJNIH INTERAKCIJA

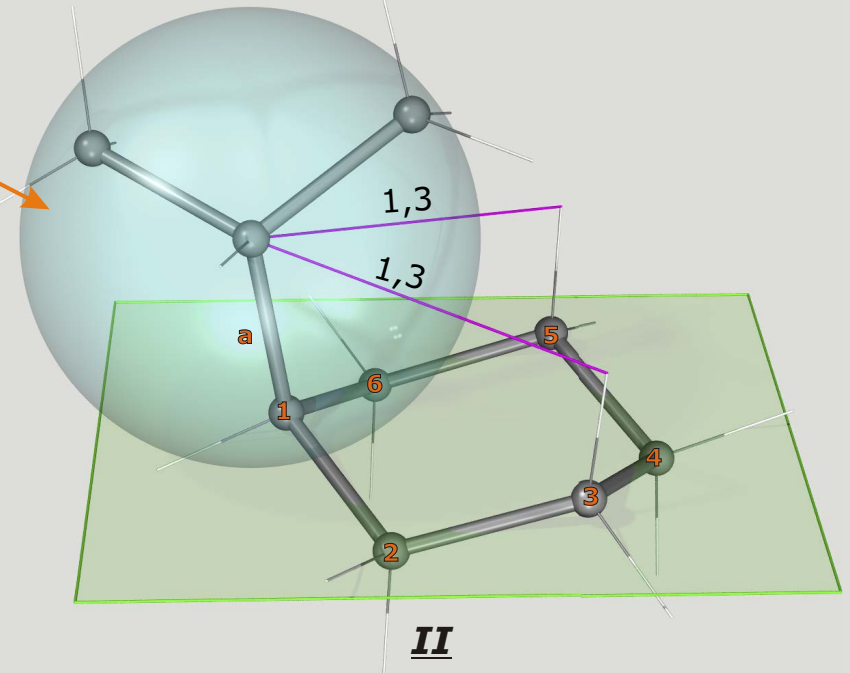


KONFORMACIJE SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - *izo*-PROPIL-CIKLOHEKSAN

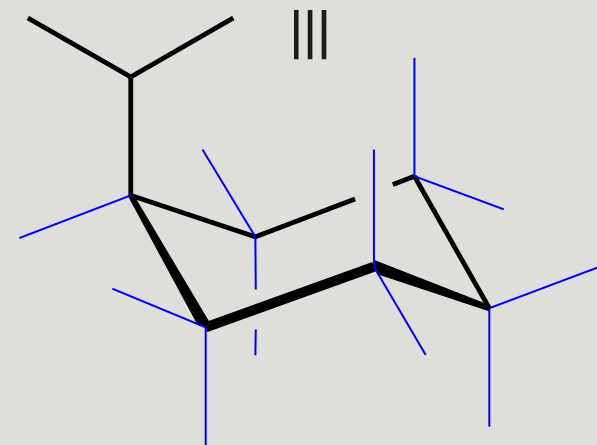
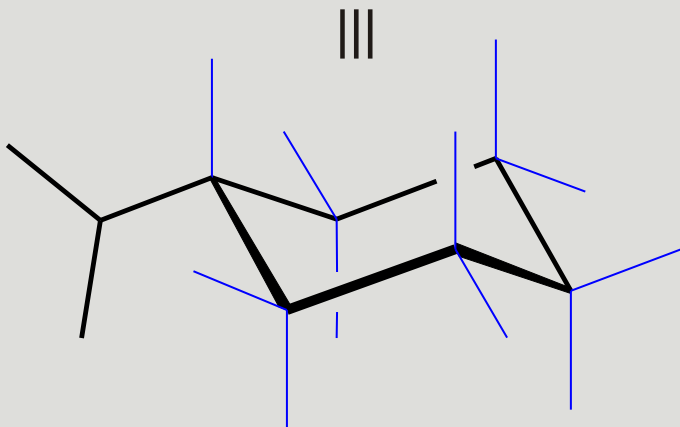
VOLUMINOZNOST
(ZAPREMINA)
izo-PROPIL GRUPE



EKVATORIJALNI KONFORMER, STABILNIJI
JE OD AKSIJALNOG ZA ~ 2.20 kcal/mol JER
NEMA 1,3-ODBOJNIH INTERAKCIJA

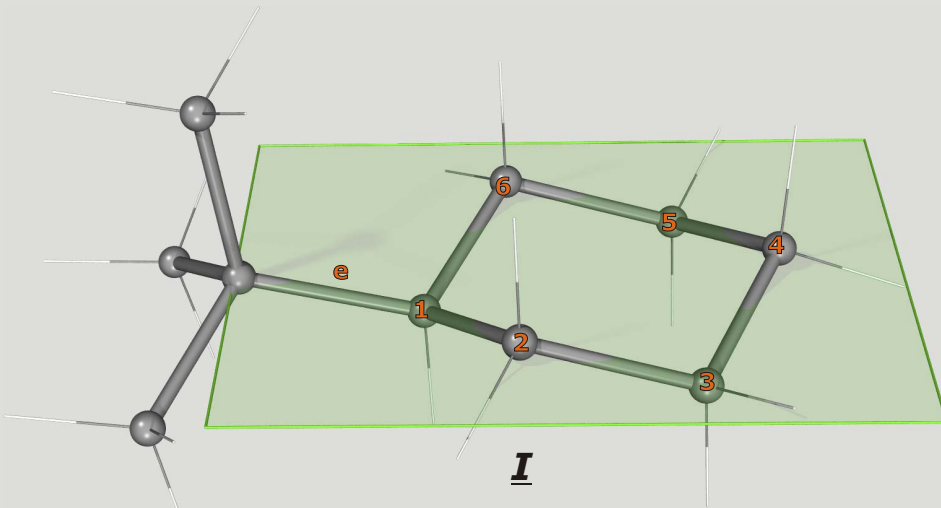


AKSIJALNI KONFORMER, NE-STABILNIJI
JE OD EKVATORIJALNOG ZA ~ 2.20 kcal/mol
ZBOG 1,3-ODBOJNIH INTERAKCIJA

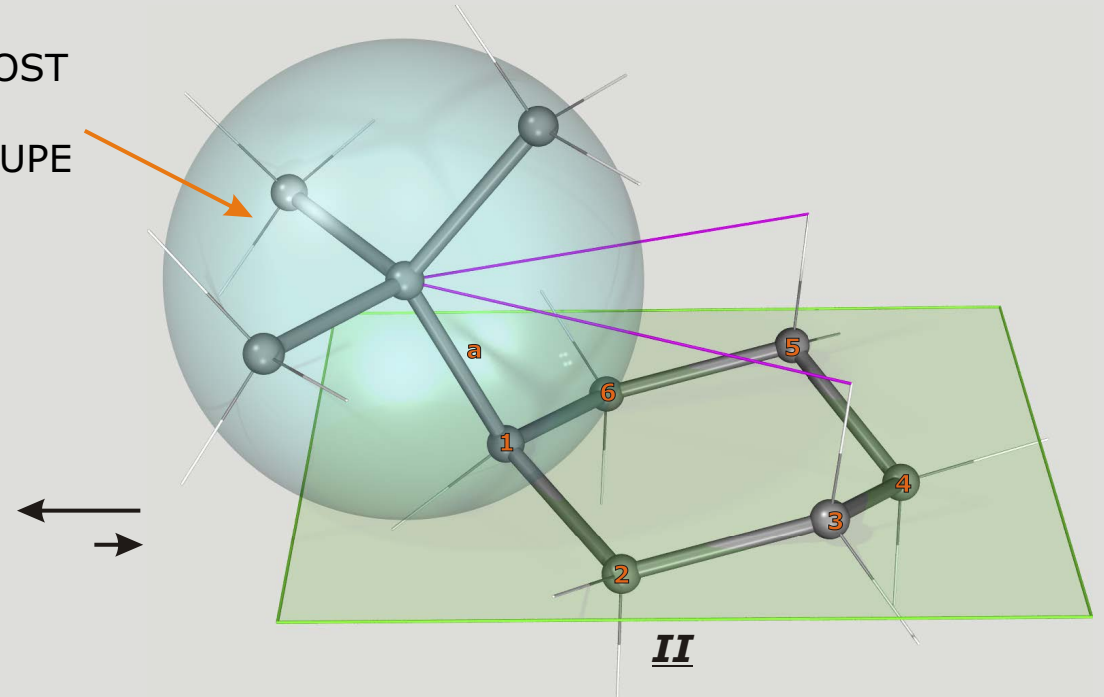


KONFORMACIJE SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - *tert*-BUTIL-CIKLOHEKSAN

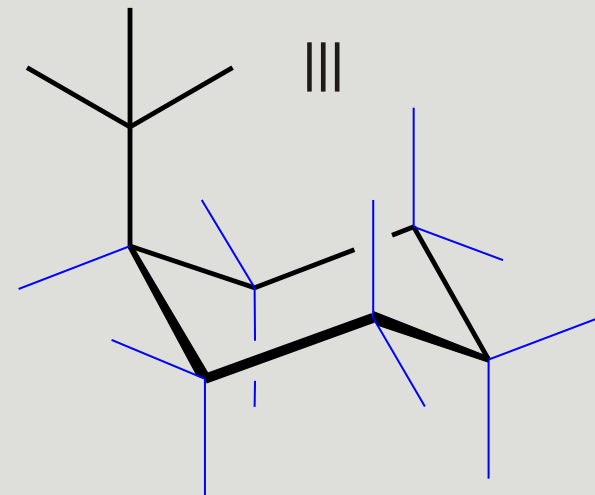
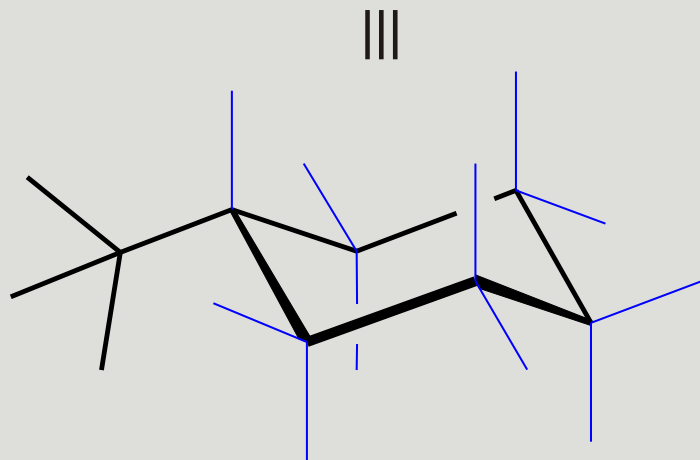
VOLUMINOZNOST
(ZAPREMINA)
tert-BUTIL GRUPE



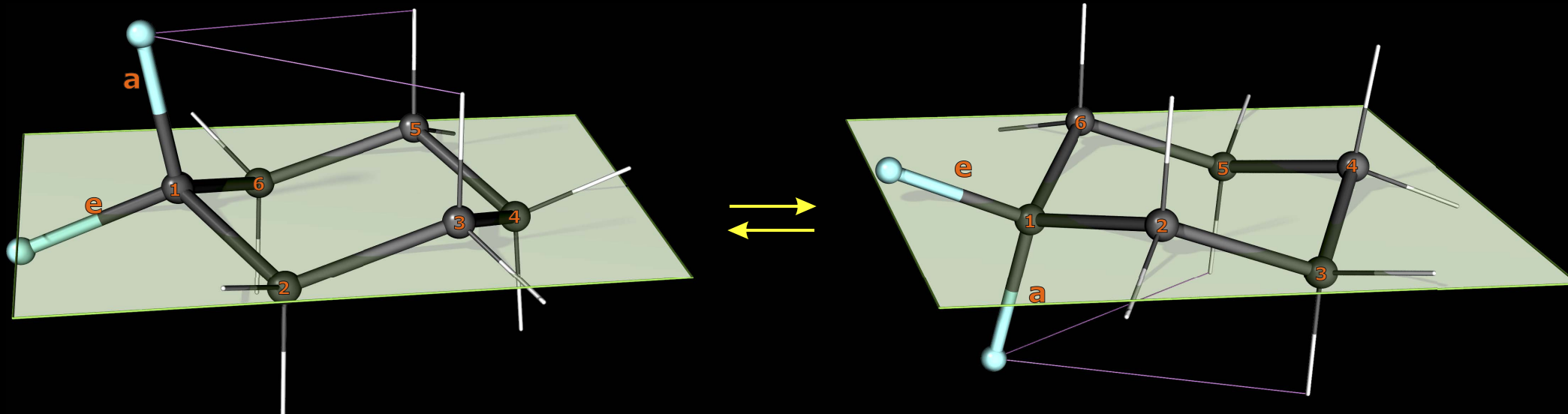
EKVATORIJALNI KONFORMER, STABILNIJI
JE OD AKSIJALNOG ZA ~ 5.0 kcal/mol JER
NEMA 1,3-ODBOJNIH INTERAKCIJA



AKSIJALNI KONFORMER, NE-STABILNIJI
JE OD EKVATORIJALNOG ZA ~ 5.0 kcal/mol
ZBOG 1,3-ODBOJNIH INTERAKCIJA



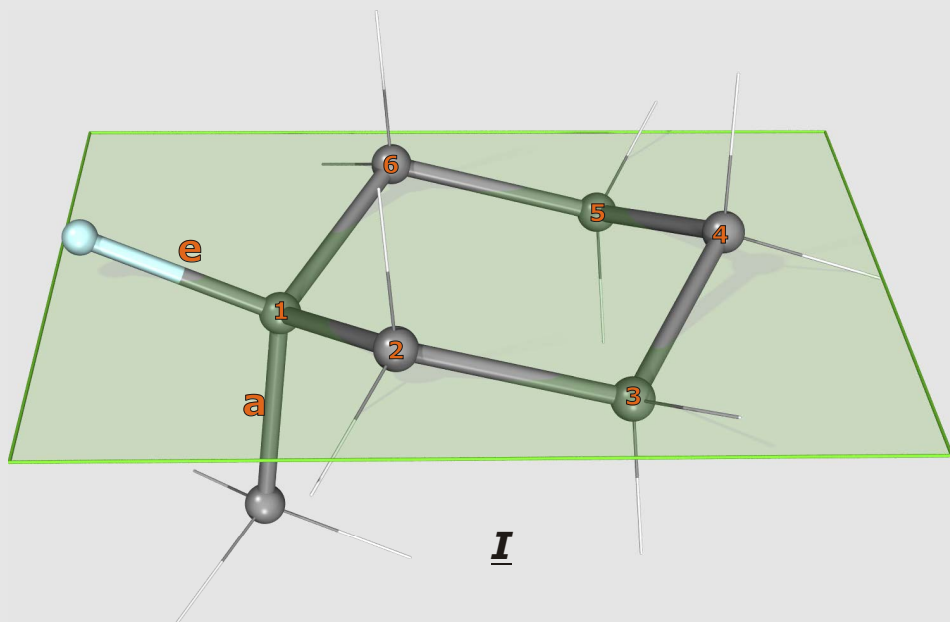
KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - 1,1 DI-FLUOR-CIKLOHEKSAN



KOD CIKLOHEKSANA KOJI SU SUPSTITUISANI NA ISTOM C ATOM, ISTIM SUPSTITUENTIMA (H, F, CH₃ itd.) JEDAN SUPSTITUENT JE UVEK EKVATORIJALAN A DRUGI UVEK AKSIJALAN. STOGA ONI IMAJU IDENTIČNE KONFORMACIONE

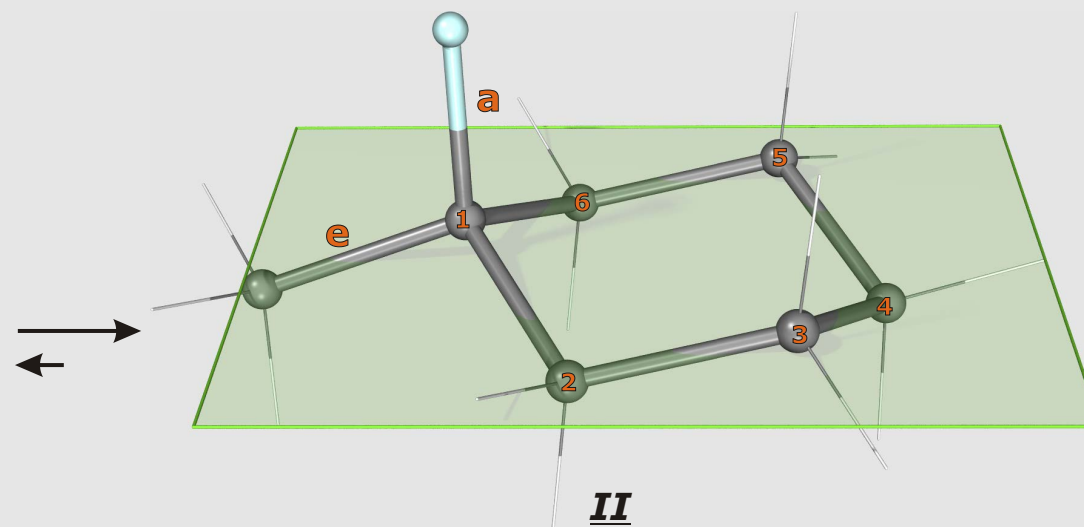
ENERGIJE. MEĐUTIM, AKO SU SUPSTITUENTI RAZLČITI, STABILNIJI JE ONAJ KONFORMER KOD KOGA JE VEĆI SUPSTITUENT U EKVATORIJALNOM POLOŽAJU. (sledeća strana).

KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA: 1-FLUOR-1-METIL-CIKLOHEKSAN



POŠTO JE FLUOR MANJE VOLUMINOZAN OD METIL GRUPE, SLEDI:

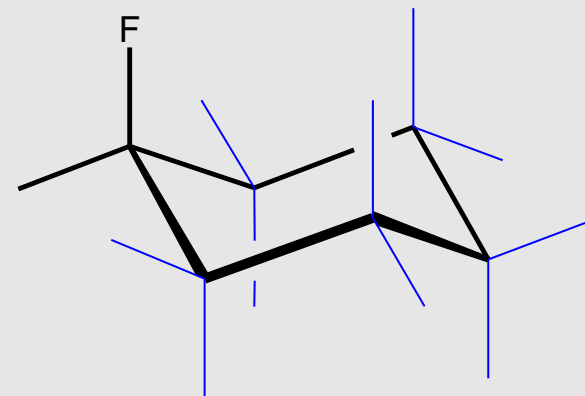
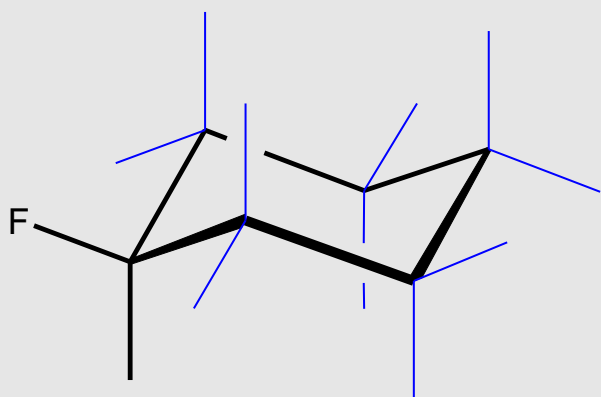
KONFORMER **I**, U KOME JE METIL GRUPA AKSIJALNA, MANJE JE STABILAN OD SUPROTNOG KONFORMERA **II**, U KOME JE METIL GRUPA



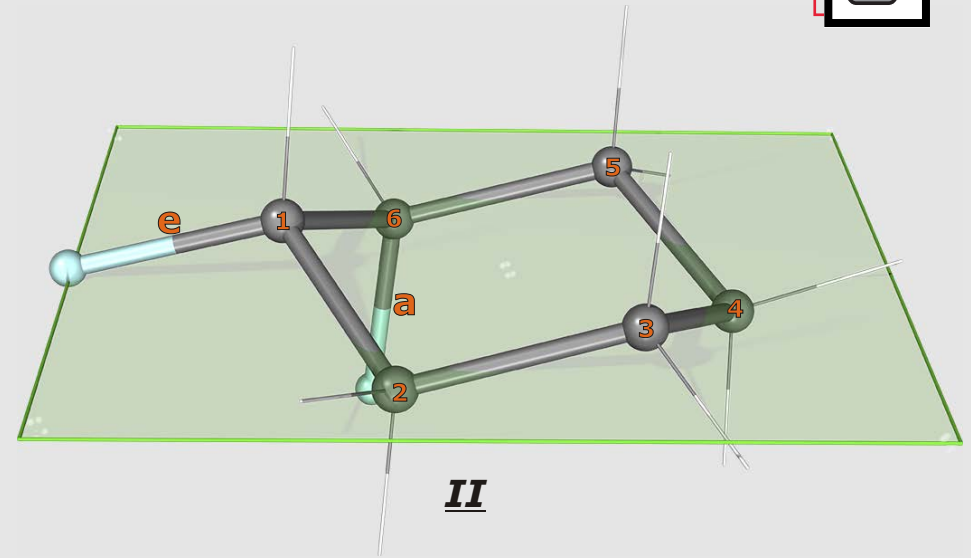
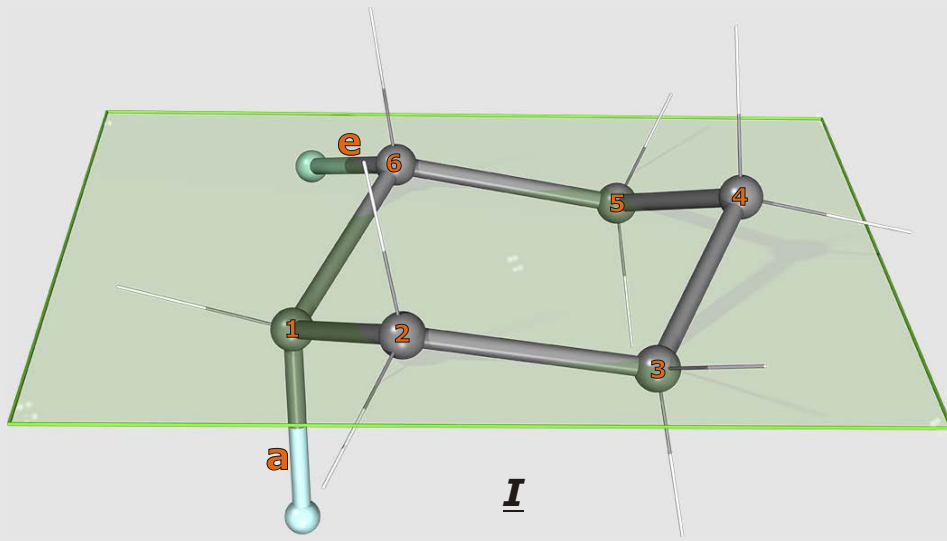
EKVATORIJALNA.

DAKLE:

DAKLE U RAVNOTEŽNOJ SMESI, KONFORMER **II** ĆE BITI VIŠE ZASTUPLJEN OD KONFORMERA **I**.



KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - cis-1,2 DI-FLUOR-CIKLOHEKSAN

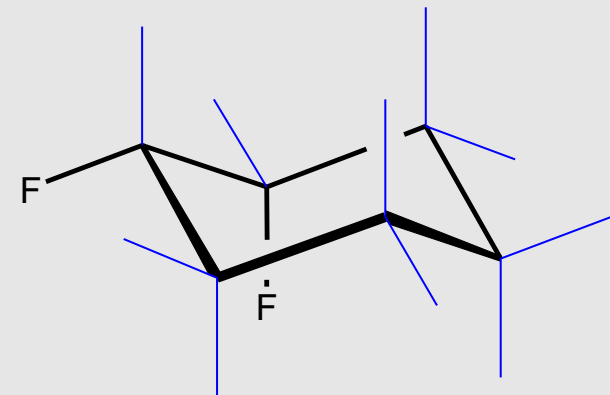
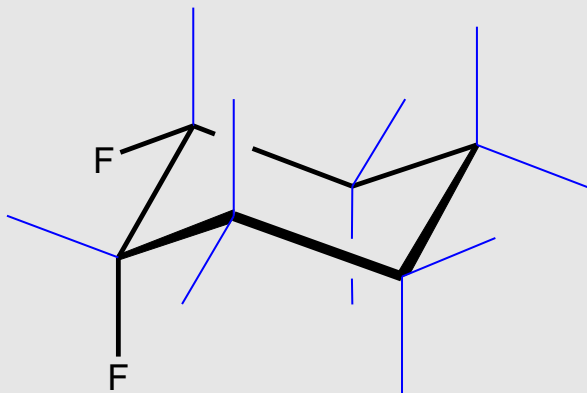


POŠTO JE KOD OBA KONFORMERA JEDAN ATOM FLUORA AKSIJALAN A DRUGI EKVATORIJALAN, SLEDI:

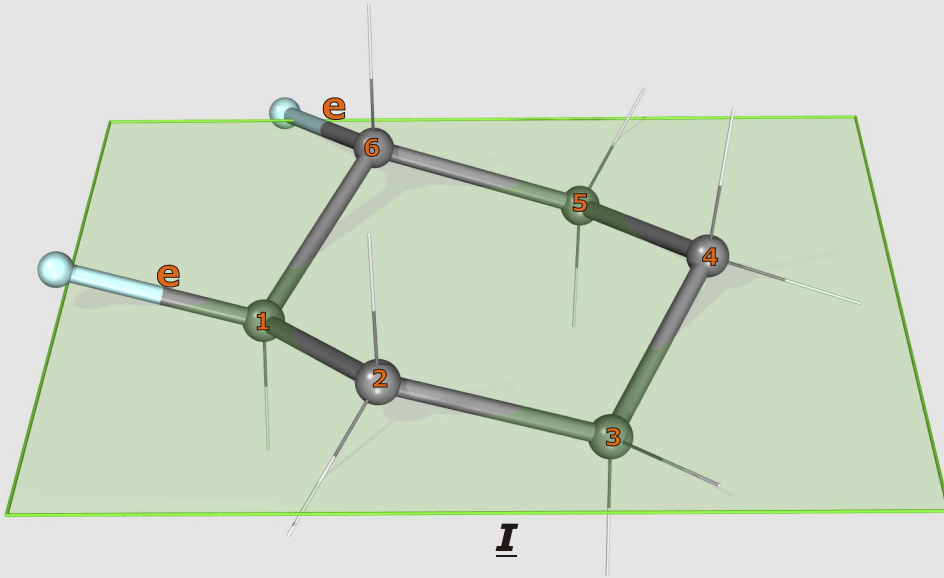
KONFORMER **I**, I **II**, IMAJU PODJEDNAKU STABILNOST.

DAKLE:

DAKLE U RAVNOTEŽNOJ SMESI, KONFORMER **I** I **II** ĆE BITI PODJEDNAKO ZASTUPJENI .



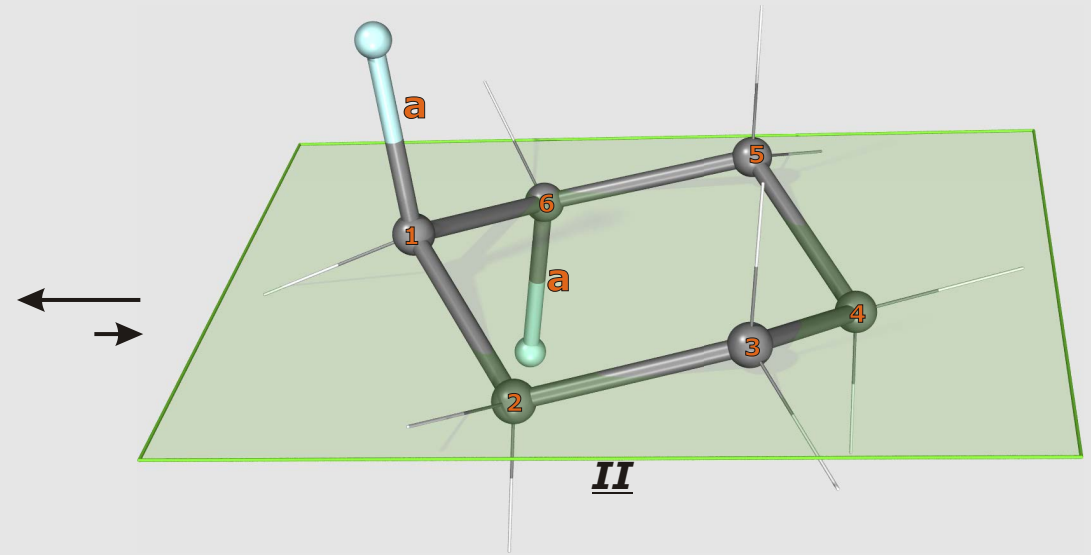
KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - trans-1,2 DI-FLUOR-CIKLOHEKSAN



KOD KONFORMERA **I** OBA ATOMA FLUORA SU EKVATORIJALANI, A KOD KONFORMERA **II** OBA ATOMA FLUORA SU AKSIJALNI.

SLEDI:

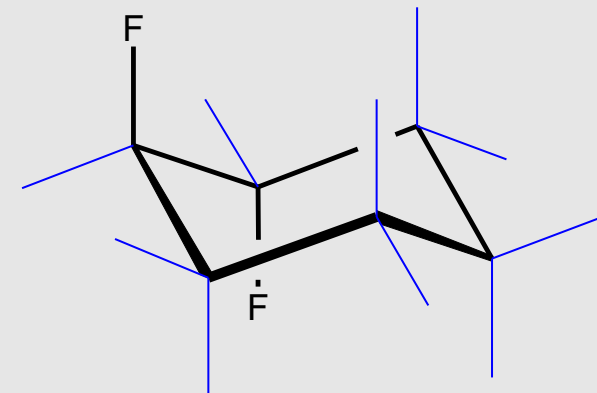
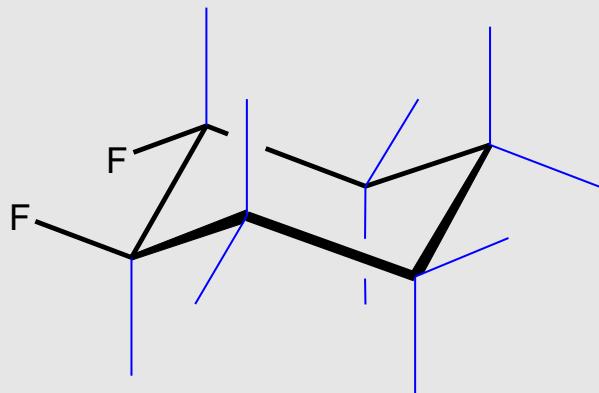
KONFORMER **I** JE DALEKO STABILNIJI OD



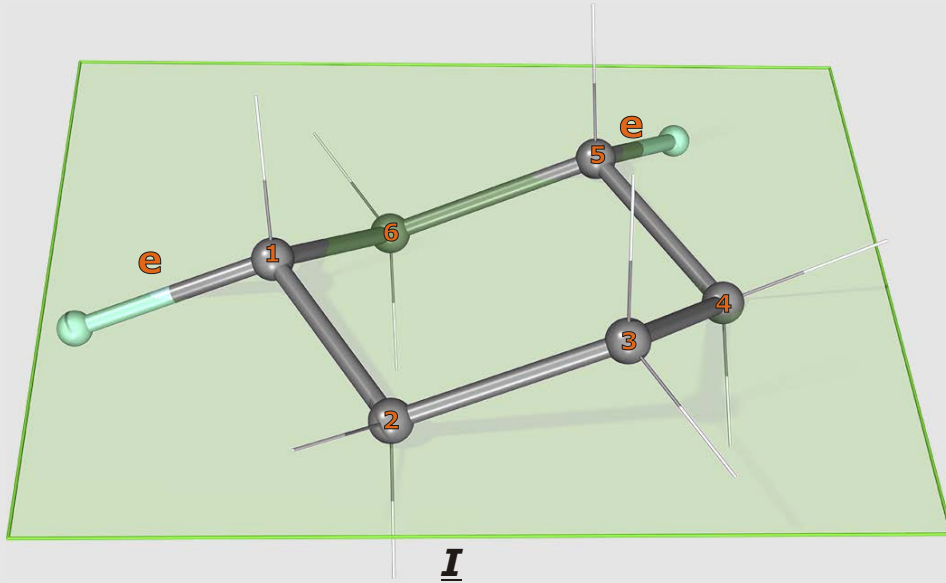
KONFORMERA **II**.

DAKLE:

U RAVNOTEŽNOJ SMESI, KONFORMER **I** ĆE ĆE BITI DALEKO VIŠE ZASTUPLJEN OD KONFORMERA **II** .



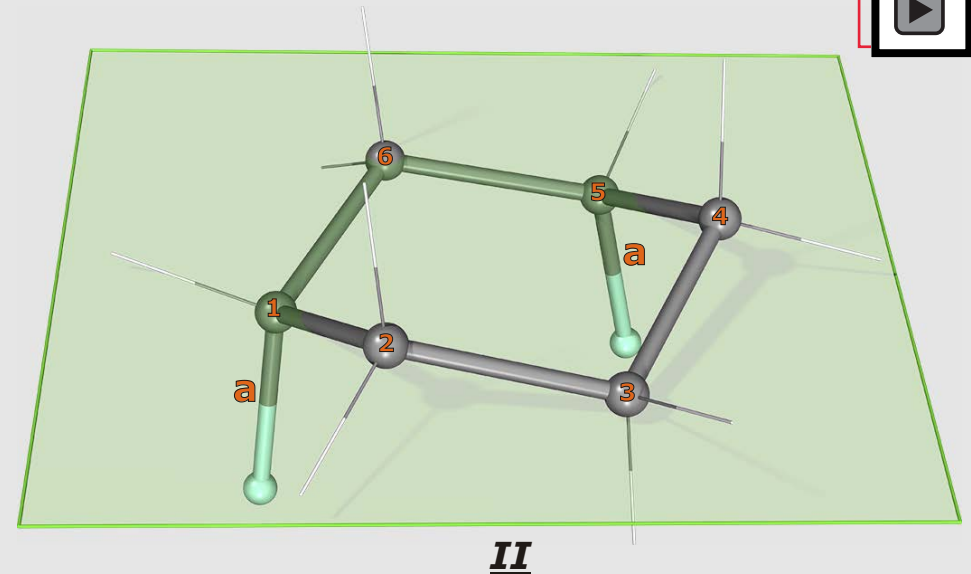
KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - cis-1,3 DI-FLUOR-CIKLOHEKSAN



KOD KONFORMERA **I** OBA ATOMA FLUORA SU EKVATORIJALANI, A KOD KONFORMERA **II** OBA ATOMA FLUORA SU AKSIJALNI.

SLEDI:

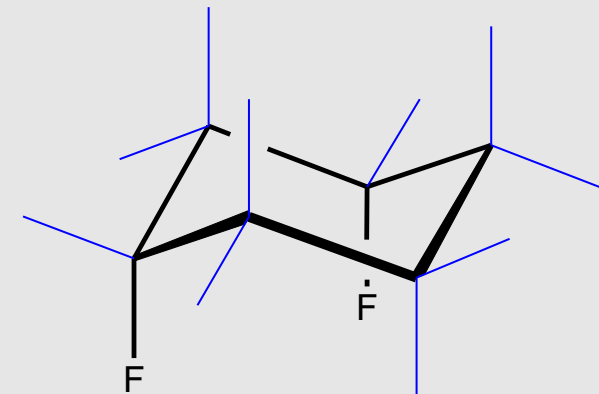
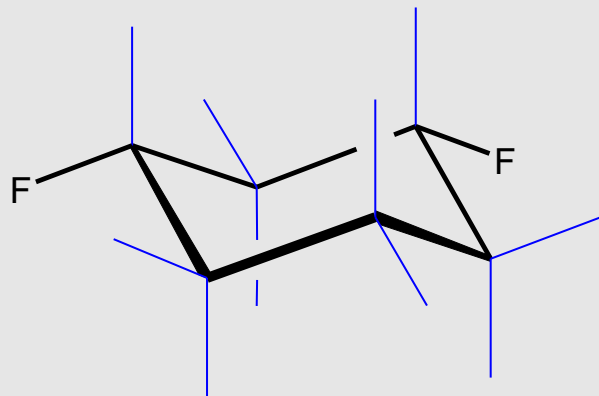
KONFORMER **I** JE DALEKO STABILNIJI OD



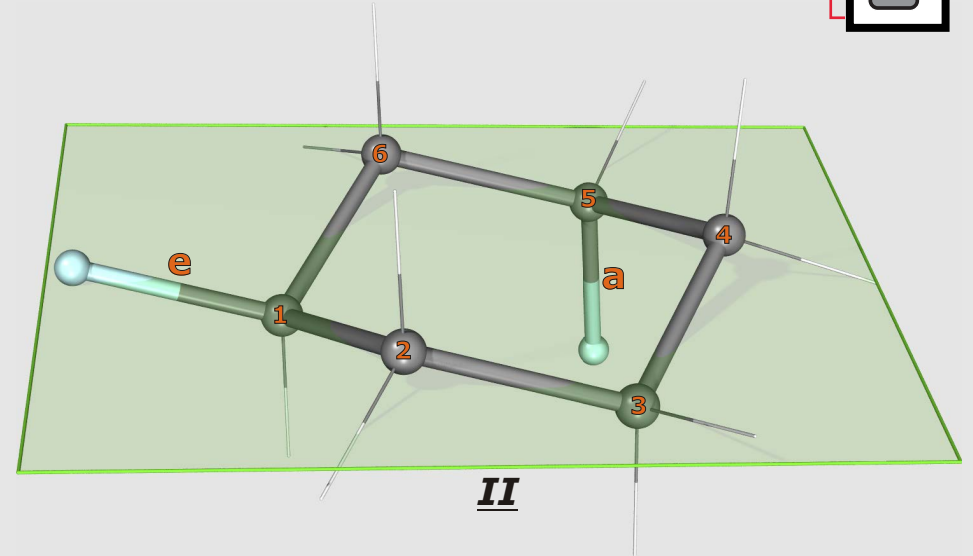
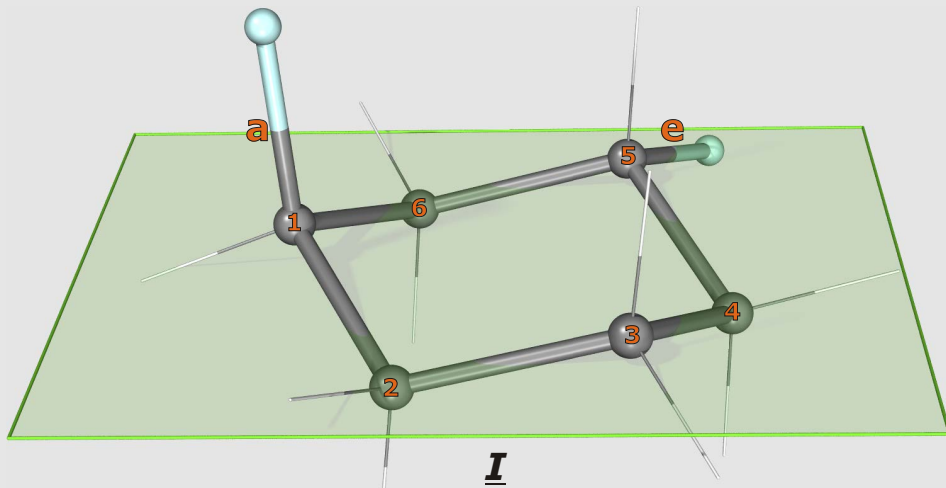
KONFORMERA **II**.

DAKLE:

U RAVNOTEŽNOJ SMESI, KONFORMER **I** ĆE ĆE BITI DALEKO VIŠE ZASTUPLJEN OD KONFORMERA **II**.



KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - trans-1,3 DI-FLUOR-CIKLOHEKSAN

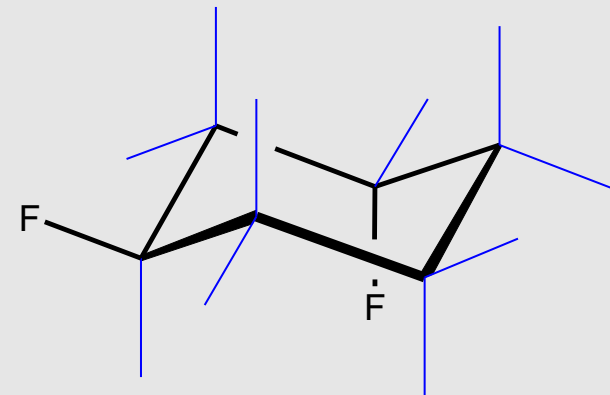
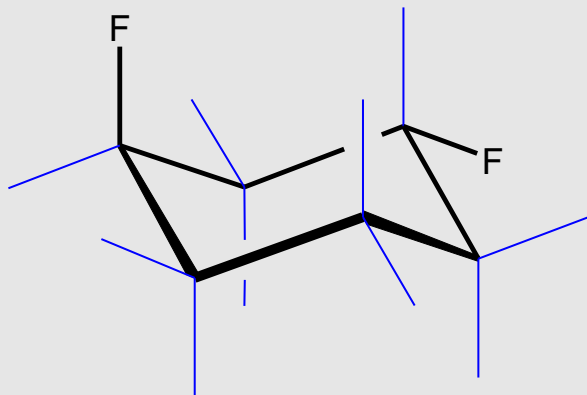


POŠTO JE KOD OBA KONFORMERA JEDAN ATOM FLUORA AKSIJALAN A DRUGI EKVATORIJALAN, SLEDI:

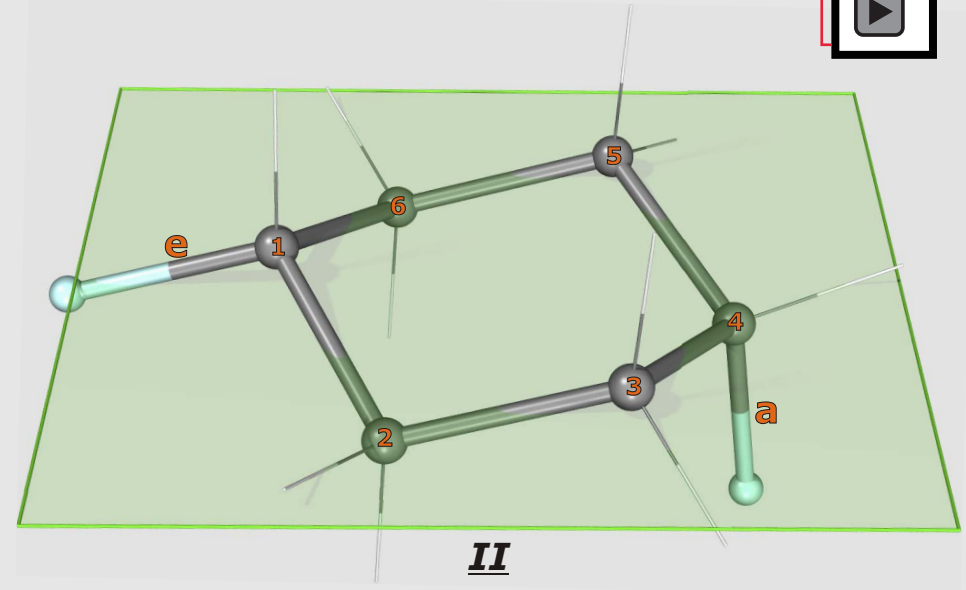
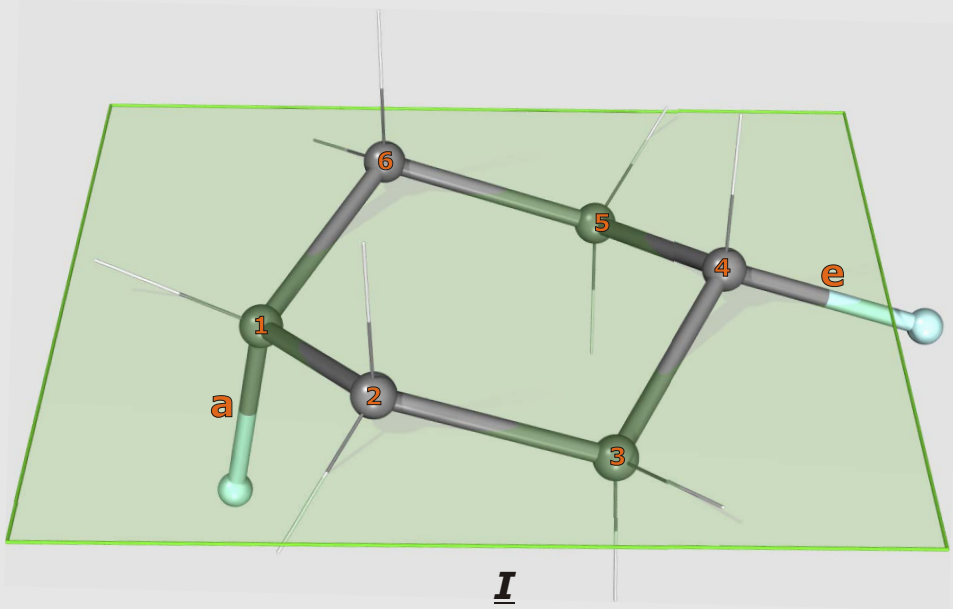
KONFORMER I, I II, IMAJU PODJEDNAKU STABILNOST.

DAKLE:

DAKLE U RAVNOTEŽNOJ SMESI, KONFORMER I I II ĆE BITI PODJEDNAKO ZASTUPJENI .



KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - cis-1,4 DI-FLUOR-CIKLOHEKSAN

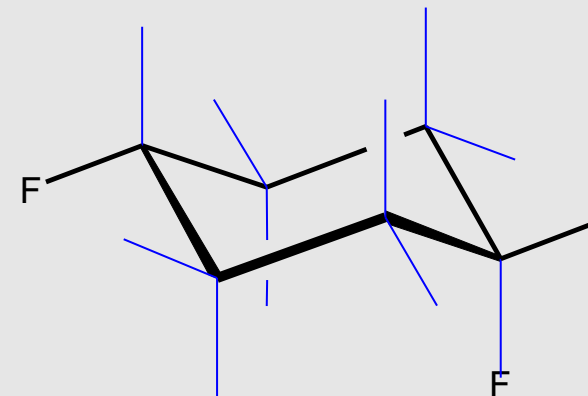
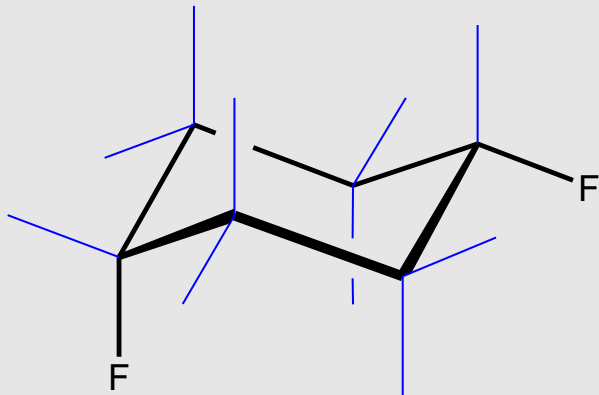


POŠTO JE KOD OBA KONFORMERA JEDAN ATOM FLUORA AKSIJALAN A DRUGI EKVATORIJALAN, SLEDI:

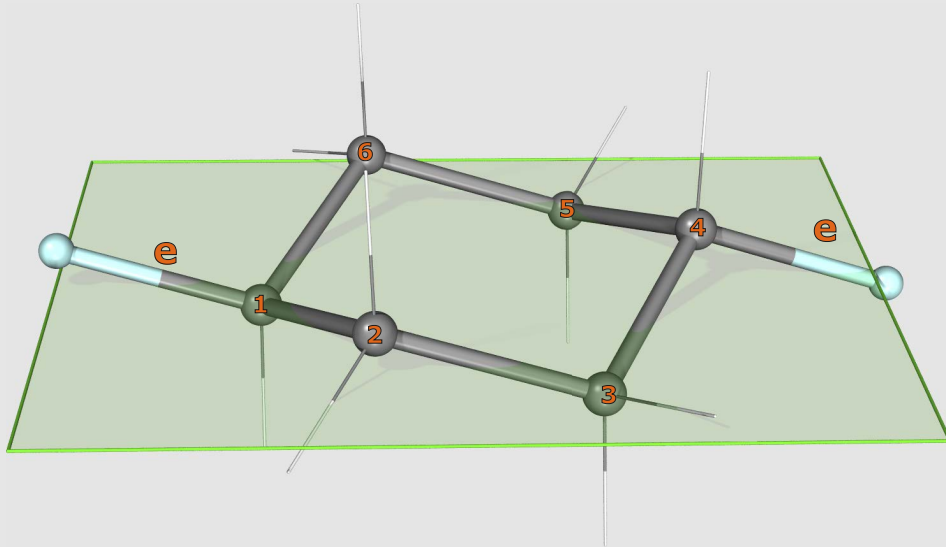
KONFORMER I I II IMAJU PODJEDNAKU STABILNOST.

DAKLE:

DAKLE U RAVNOTEŽNOJ SMESI, KONFORMER I I II ĆE BITI PODJEDNAKO ZASTUPJENI .



KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - *trans*-1,4 DI-FLUOR-CIKLOHEKSAN

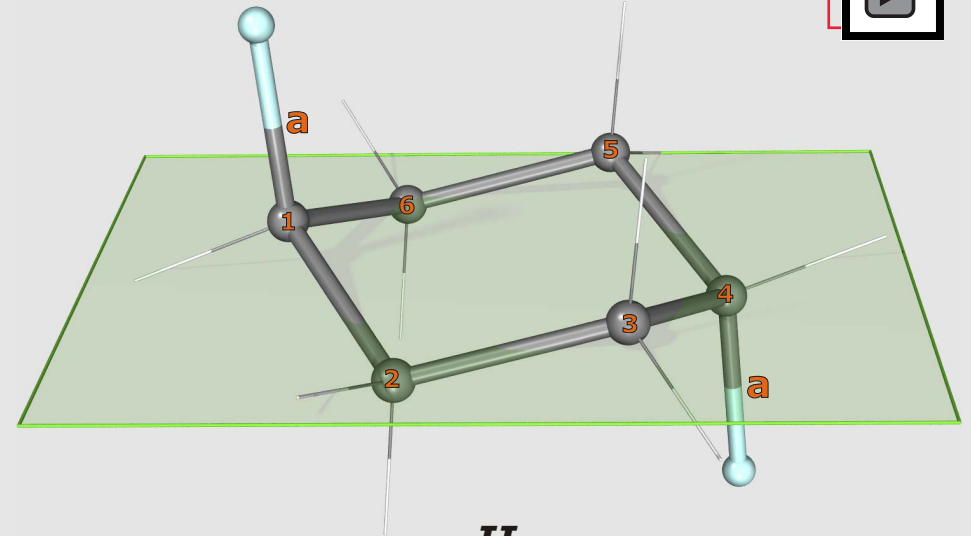


I

KOD KONFORMERA **I** OBA ATOMA FLUORA SU EKVATORIJALANI, A KOD KONFORMERA **II** OBA ATOMA FLUORA SU AKSIJALNI.

SLEDI:

KONFORMER **I** JE DALEKO STABILNIJI OD

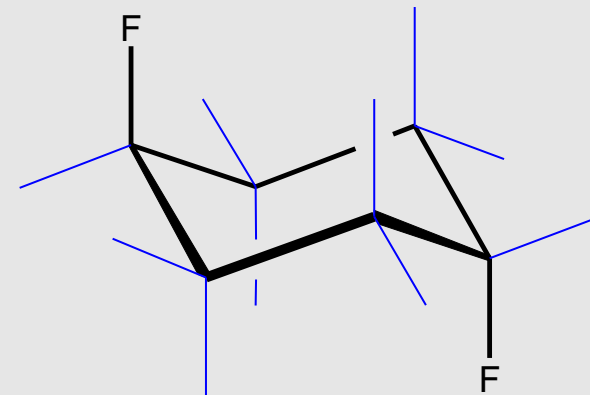
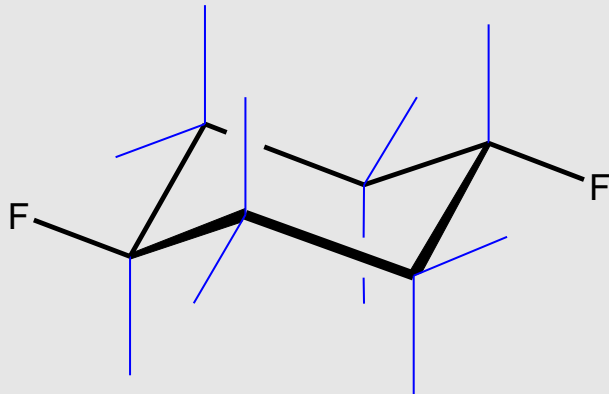


II

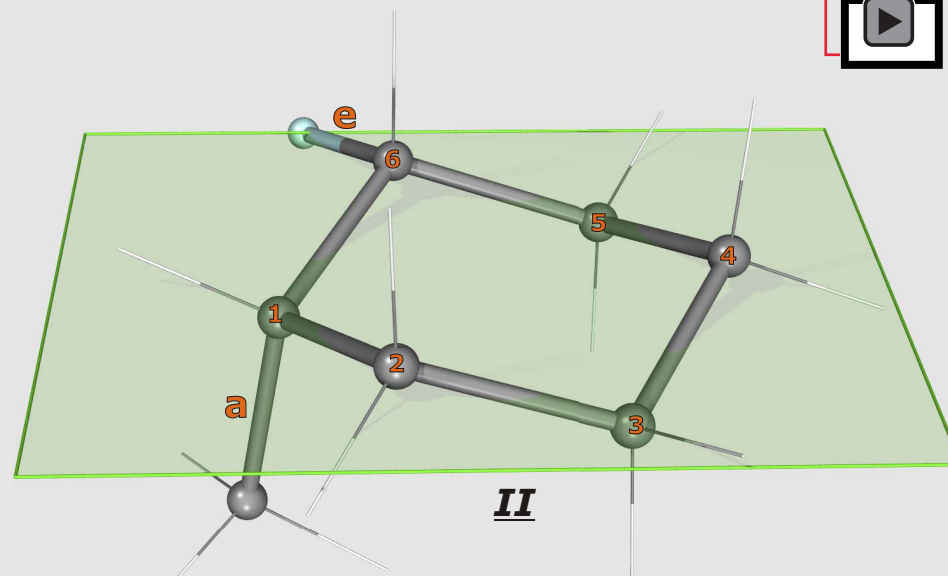
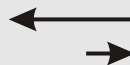
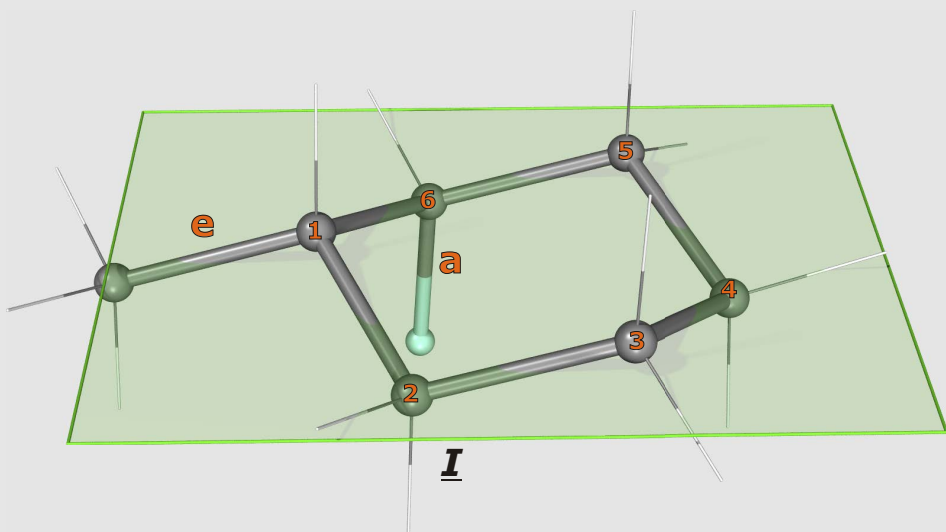
KONFORMERA **II**.

DAKLE:

U RAVNOTEŽNOJ SMESI, KONFORMER **I** ĆE ĆE BITI DALEKO VIŠE ZASTUPLJEN OD KONFORMERA **II**.



KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA: *cis*-1-METIL-2-FLUOR-CIKLOHEKSAN

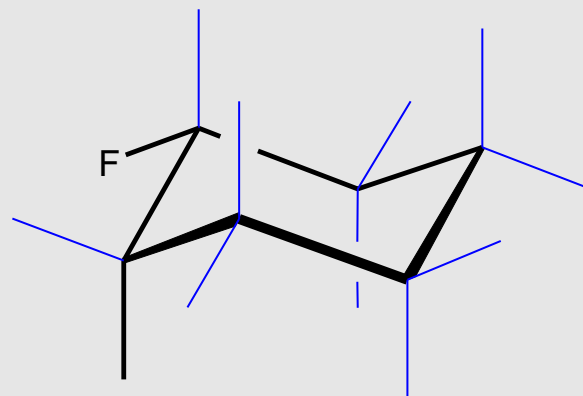
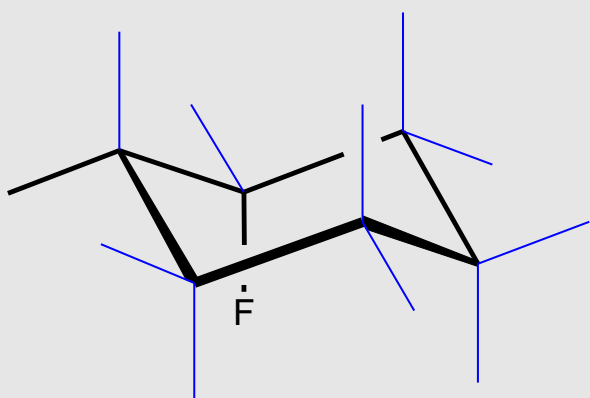


KOD KONFORMERA **I** METIL GRUPA JE EKVATORIJALANA, A FLUOR AKSIJALNI. KOD KONFORMERA **II** JE OBRNUTO, METIL GRUPA JE AKSIJALNA, A FLUOR EKVATORIJALNI. POŠTO JE METIL GRUPA VOLUMINOZNIJA OD ATOMA

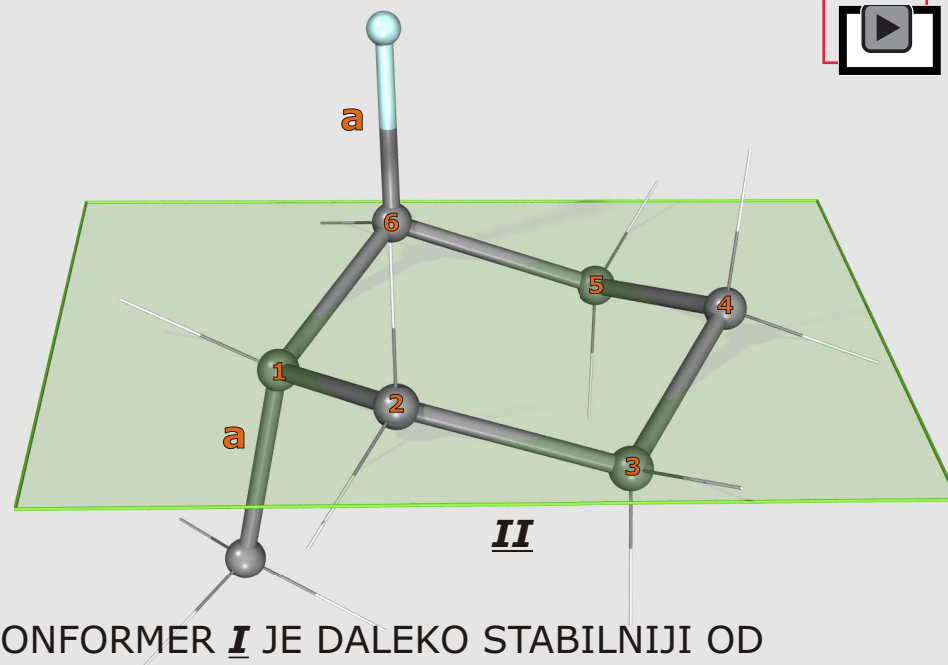
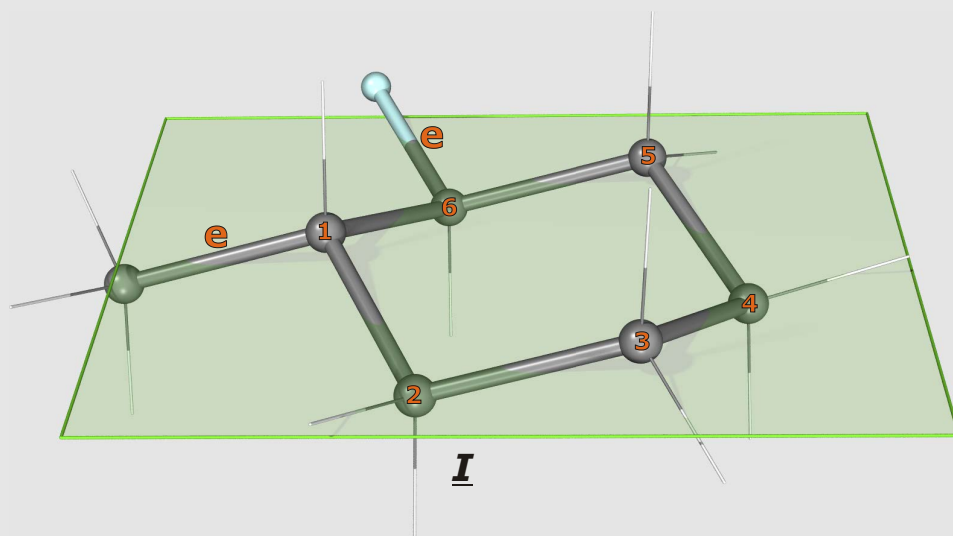
FLUORA, KONFORMER **I** JE STABILNIJI OD KONFORMERA **II** .

DAKLE:

U RAVNOTEŽNOJ SMESI, KONFORMER **I** ĆE ĆE BITI VIŠE ZASTUPLJEN OD KONFORMERA **II** .



KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA: *trans*-1-METIL-2-FLUOR-CIKLOHEKSAN



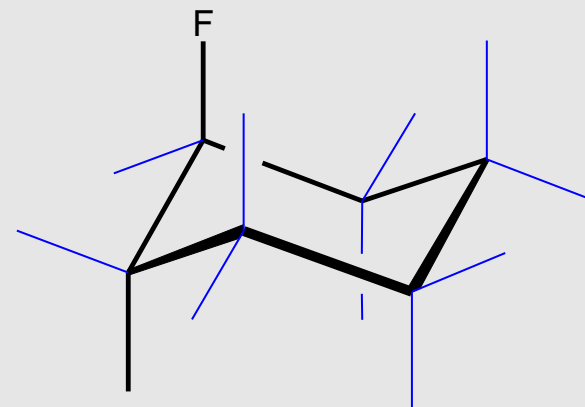
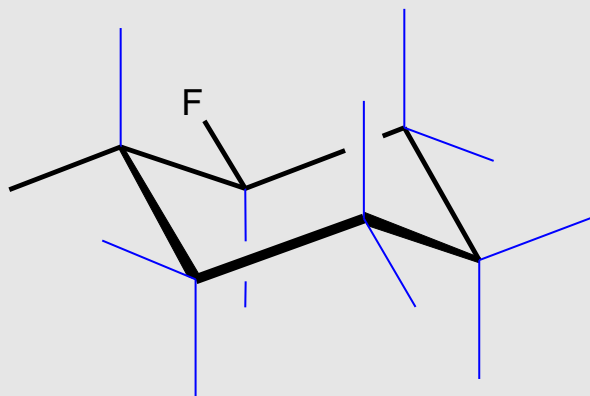
KOD KONFORMERA I OBA SUPSTITUENTA (METIL GRUPA I FLUOR) SU EKVATORIJALANI, A KOD KONFORMERA II SU OBA SUPSTITUENTA AKSIJALNI.

SLEDI:

KONFORMER I JE DALEKO STABILNIJI OD KONFORMERA II.

DAKLE:

U RAVNOTEŽNOJ SMESI, KONFORMER I ĆE BITI DALEKO VIŠE ZASTUPLJEN OD KONFORMERA II .



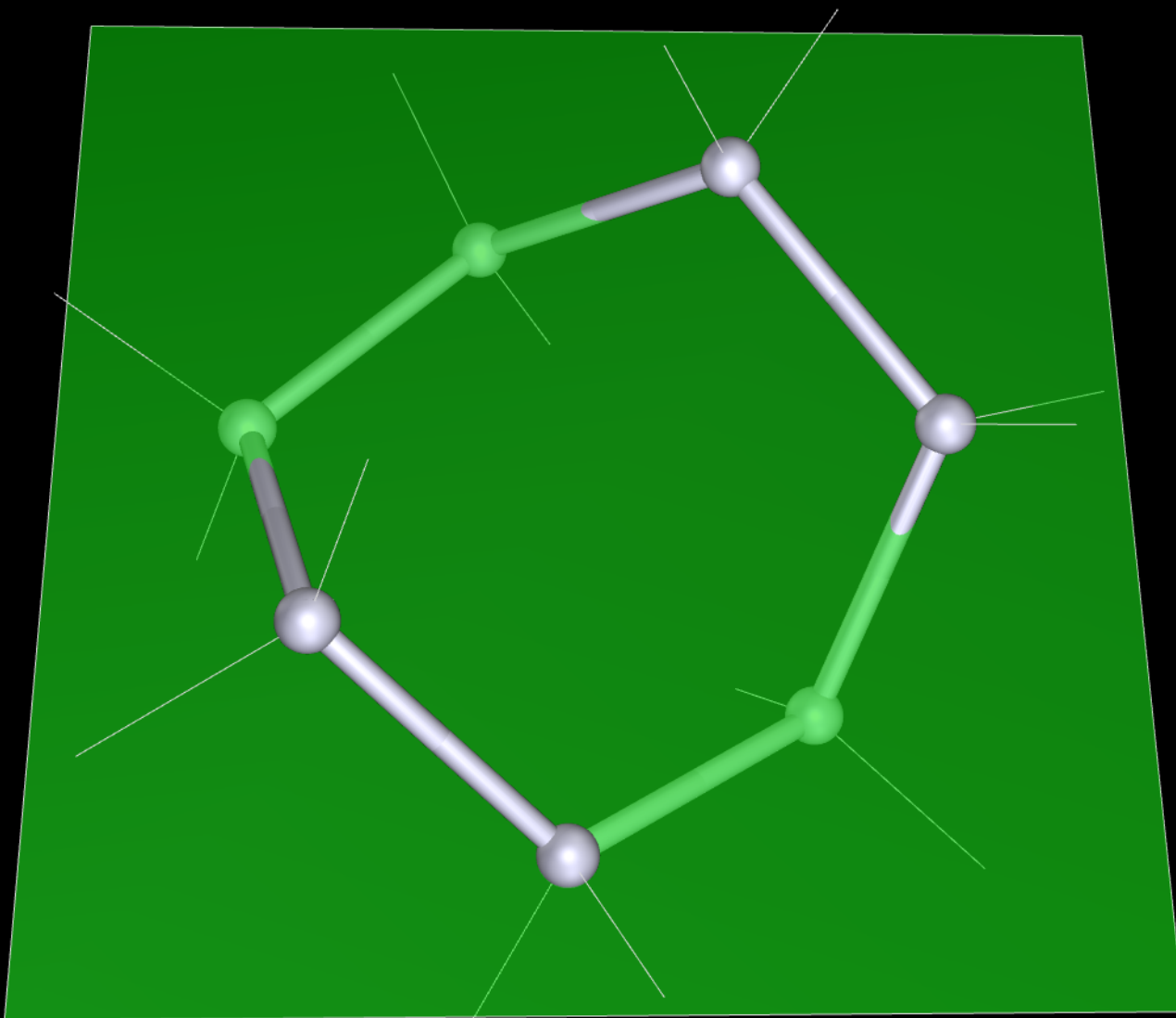
KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA (SAMO INFORMATIVNO)



OVI PRSTENOVI IMAJU VELIKI BROJ KONFORMACIJA SLIČNE ENERGIJE. NE POSTOJE KONFORMACIJE KOJE SU IZRAZITO STABILNE (KAO ŠTO JE TO KONFORMACIJA STOLICE KOD CIKLOHEKSANA). STOGA POJEDINI KONFORMERI LAKO PRELAZE JEDAN U DRUGI, UZ MALU ENERGETSKU BARIJERU. OVDE SE, ISKLJUČIVO KAO ILUSTRACIJA, PRIKAZUJU KONFORMACIJE CIKLOALKANA, SA 7-12 C ATOMA U PRSTENU. SVI KONFORMERI SADRŽE ODREĐENI NAPON (U ODNOSU NA ALKANE OTVORENOG NIZA). PRSTENOVI SA ~14 I VIŠE ČLANOVA NEMAJU OVAJ NAPON, ODN. IMAJU ISTU ENERGIJU KAO I ALKANI OTVORENOG NIZA.

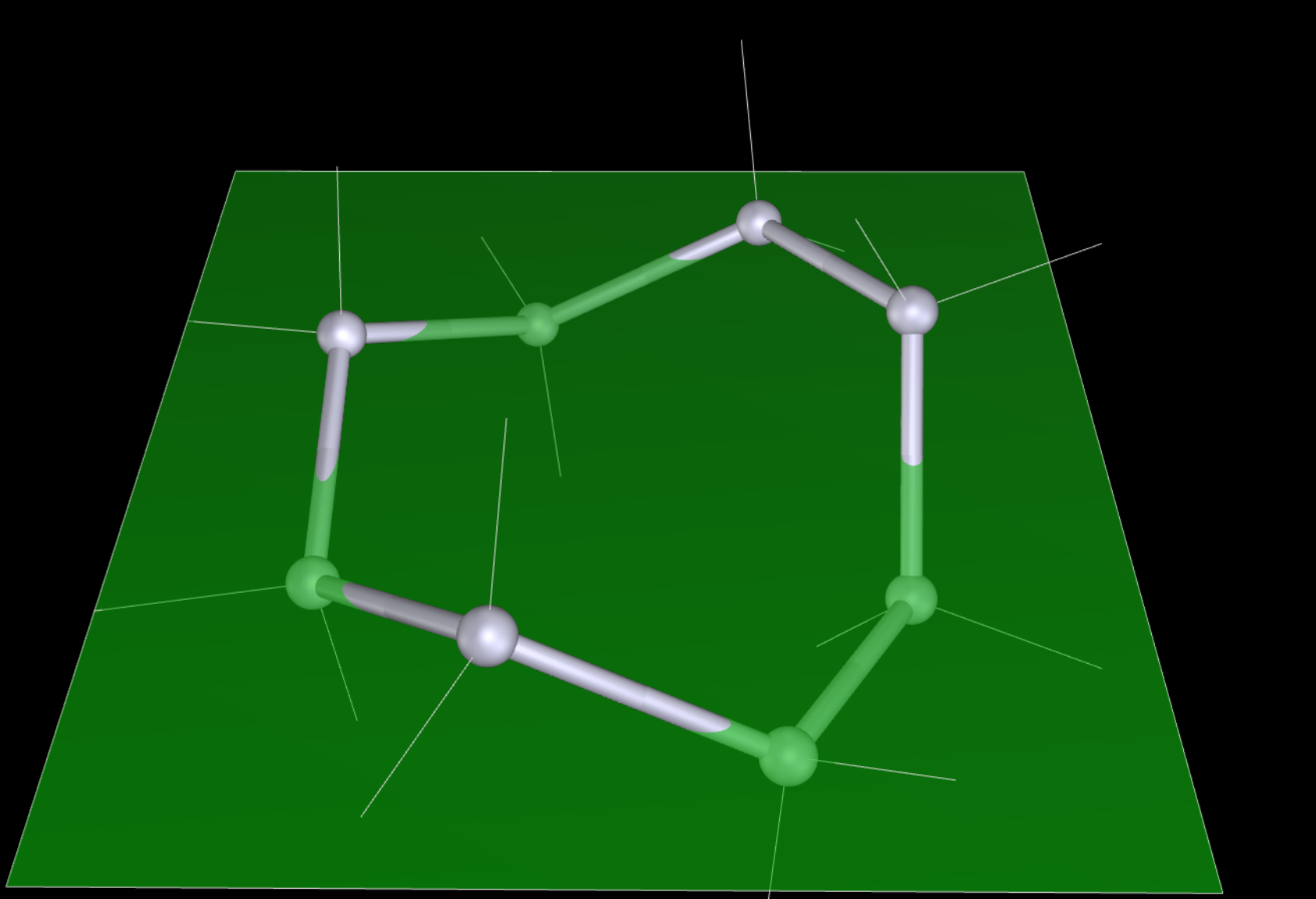
KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA (SAMO INFORMATIVNO)

Konformacija cikloheptana proračunata *ab initio* metodom. Postoji veći broj konformacija slične energije, koje lako prelaze jedna u drugu. Nema posebno stabilnih konformacija, analognih konformaciji stolice kod cikloheksana. I najstabilnije konformacije imaju određeni sterni napon (konformacionu energiju), u poređenju sa acikličnim molekulom. (Cikloheksan u konformaciji stolice nema sterni napon, odn. konformaciona energija je nula.)



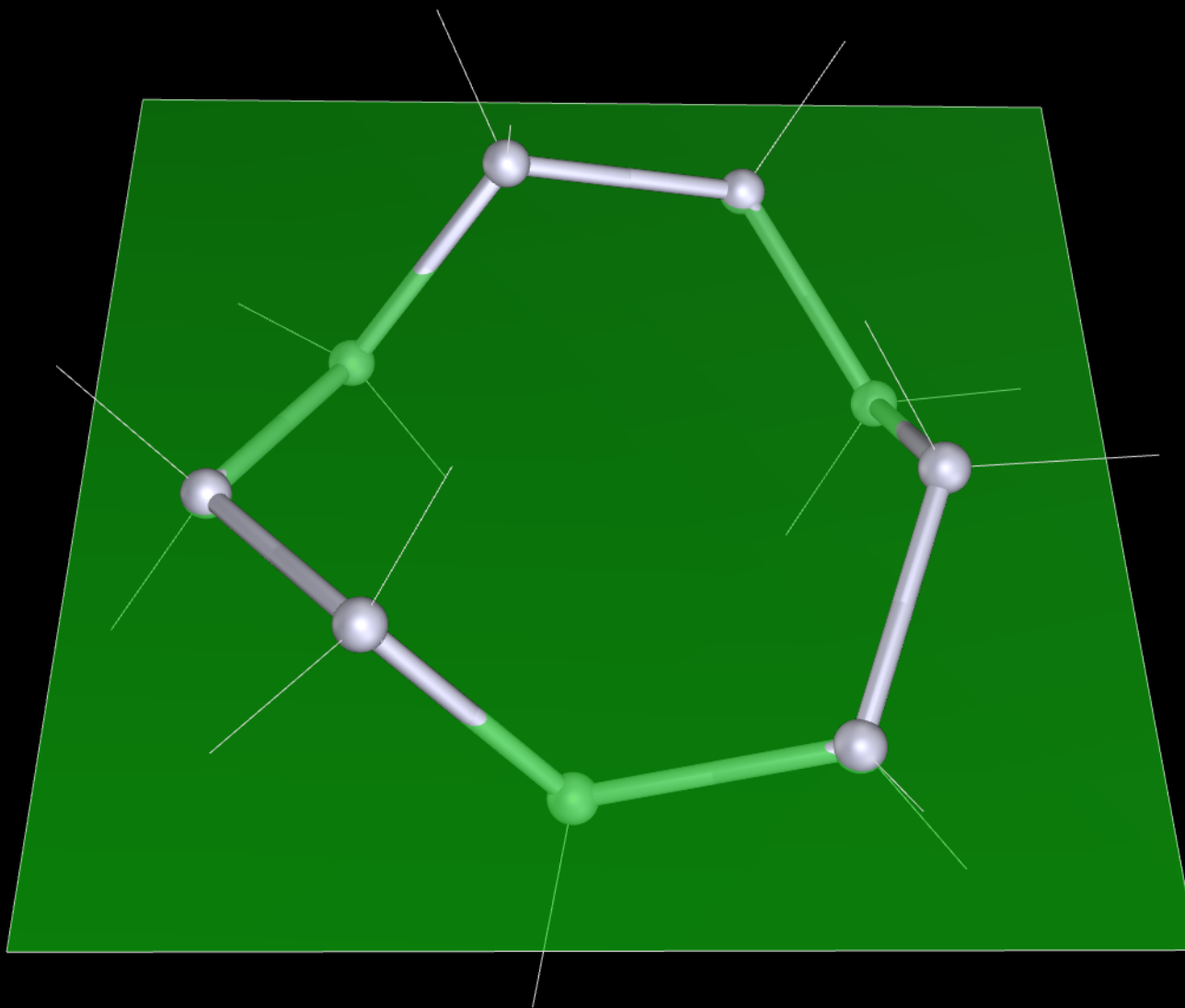
KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA (SAMO INFORMATIVNO)

Konformacija ciklooktana proračunata *ab initio* metodom. Kao i kod ostalih prstenova sa 7-13 C atoma. Postoji veći broj konformacija slične energije, koje lako prelaze jedna u drugu. Nema posebno stabilnih konformacija. I najstabilnije konformacije imaju određeni sterni napon (konformacionu energiju), u poređenju sa acikličnim molekulom. Ima veći sterni napon od cikloheptana.



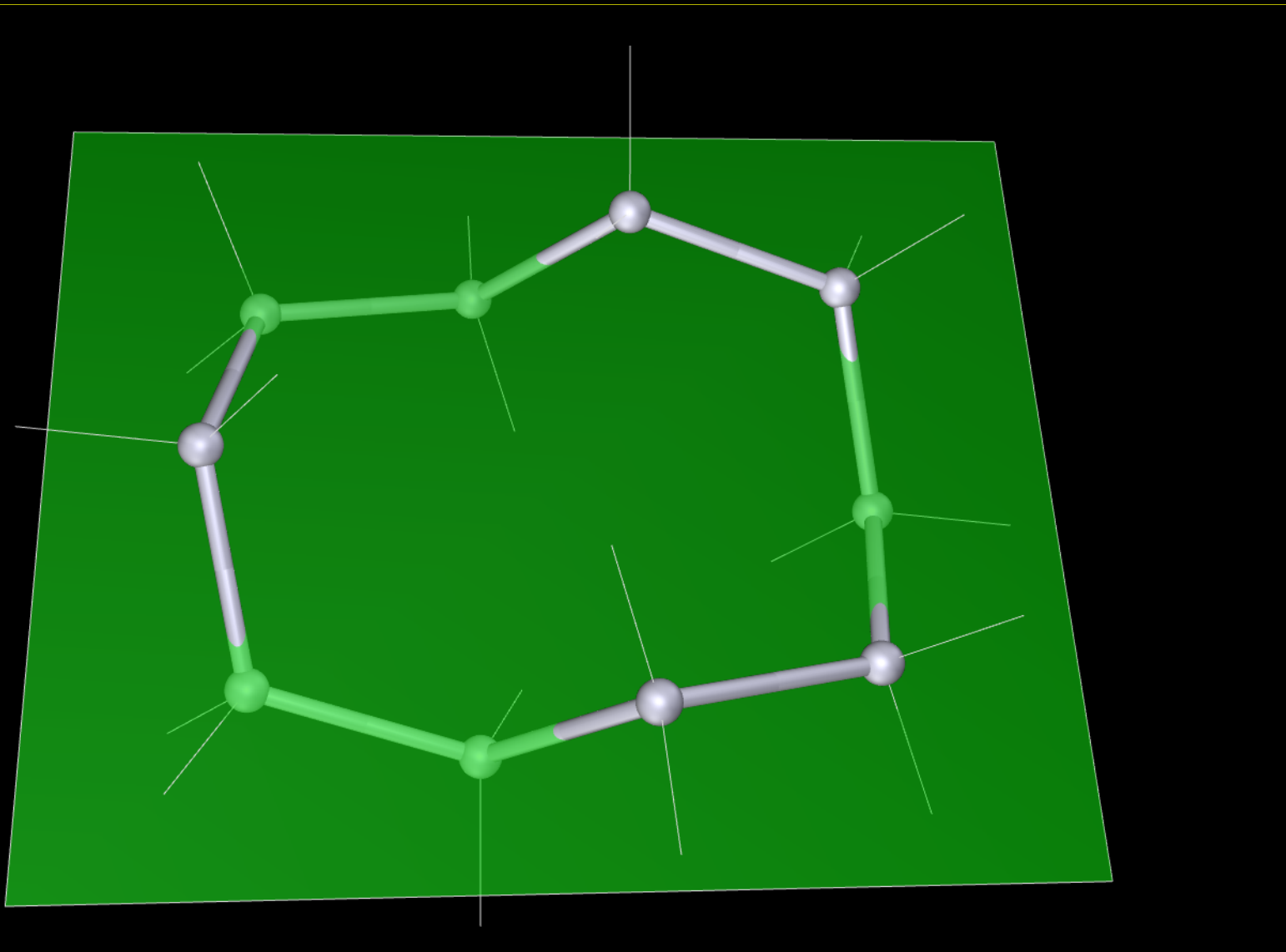
KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA (SAMO INFORMATIVNO)

Konformacija ciklononana proračunata *ab initio* metodom. Kao i kod ostalih prstenova sa 7-13 C atoma, postoji veći broj konformacija slične energije, koje lako prelaze jedna u drugu. Nema posebno stabilnih konformacija. I najstabilnije konformacije imaju određeni sterni napon (konformacionu energiju), u poređenju sa acikličnim molekulom. Ima veći sterni napon od ciklooktana.



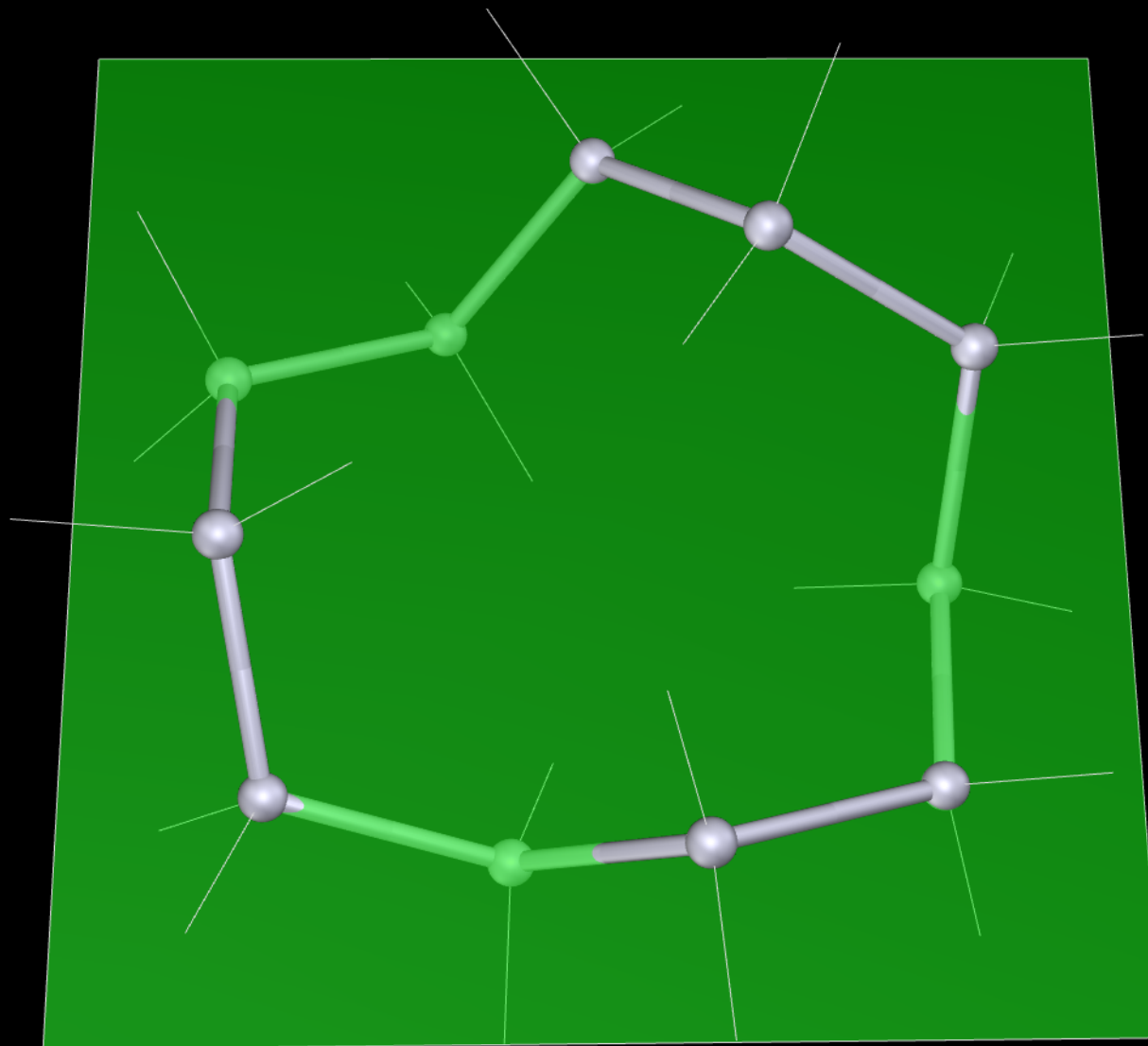
KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA (SAMO INFORMATIVNO)

Konformacija ciklodekana proračunata *ab initio* metodom. Kao i kod ostalih prstenova sa 7-13 C atoma, postoji veći broj konformacija slične energije, koje lako prelaze jedna u drugu. Nema posebno stabilnih konformacija. I najstabilnije konformacije imaju određeni sterni napon (konformacionu energiju), u poređenju sa acikličnim molekulom. Ima najveći sterni napon u seriji prstenova sa 7-13 C atoma.



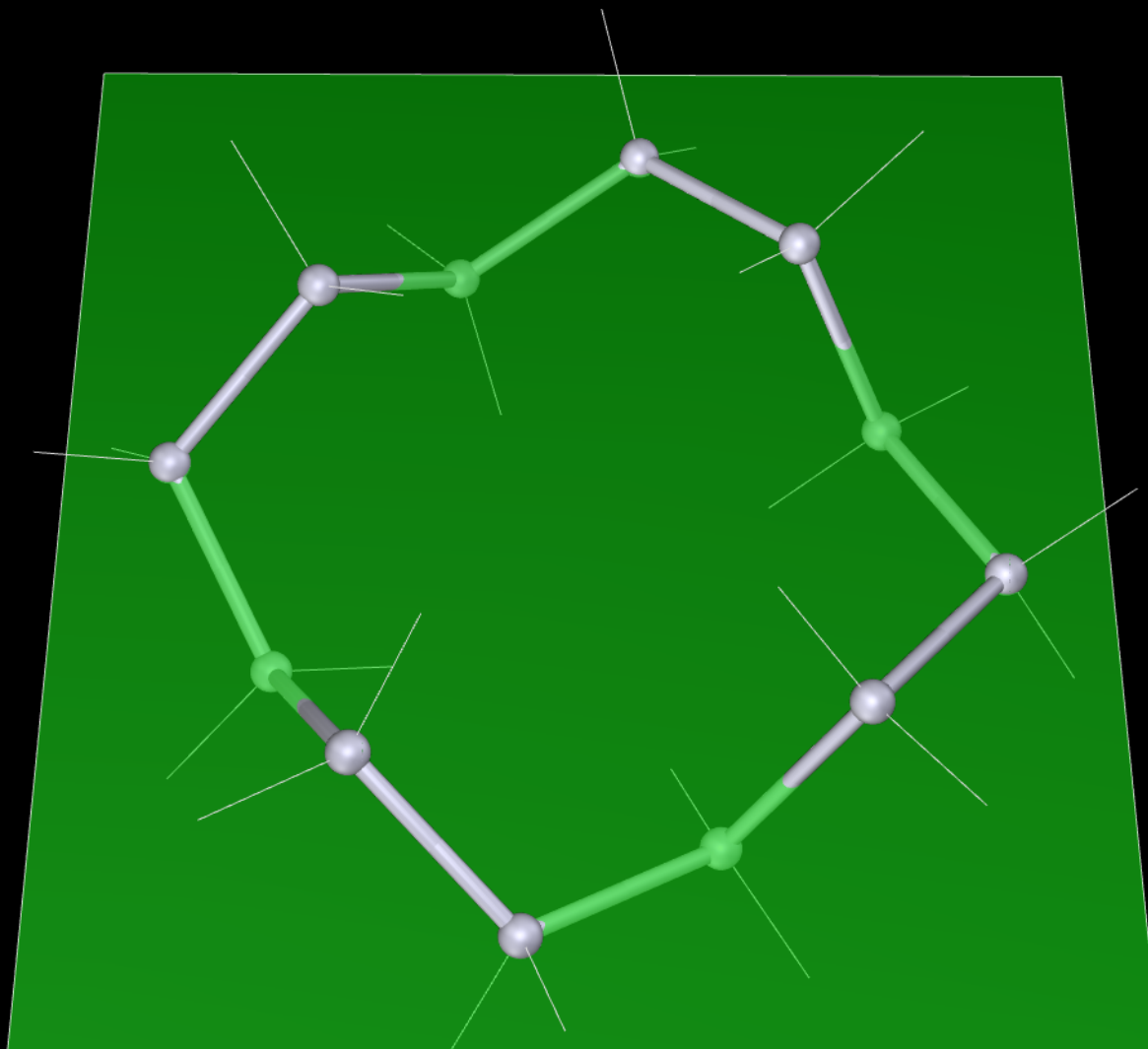
KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA (SAMO INFORMATIVNO)

Konformacija cikloundekana proračunata *ab initio* metodom. Kao i kod ostalih prstenova sa 7-13 C atoma, postoji veći broj konformacija slične energije, koje lako prelaze jedna u drugu. Nema posebno stabilnih konformacija. I najstabilnije konformacije imaju određeni sterni napon (konformacionu energiju), u poređenju sa acikličnim molekulom. Ima manji sterni napon od ciklodekana.



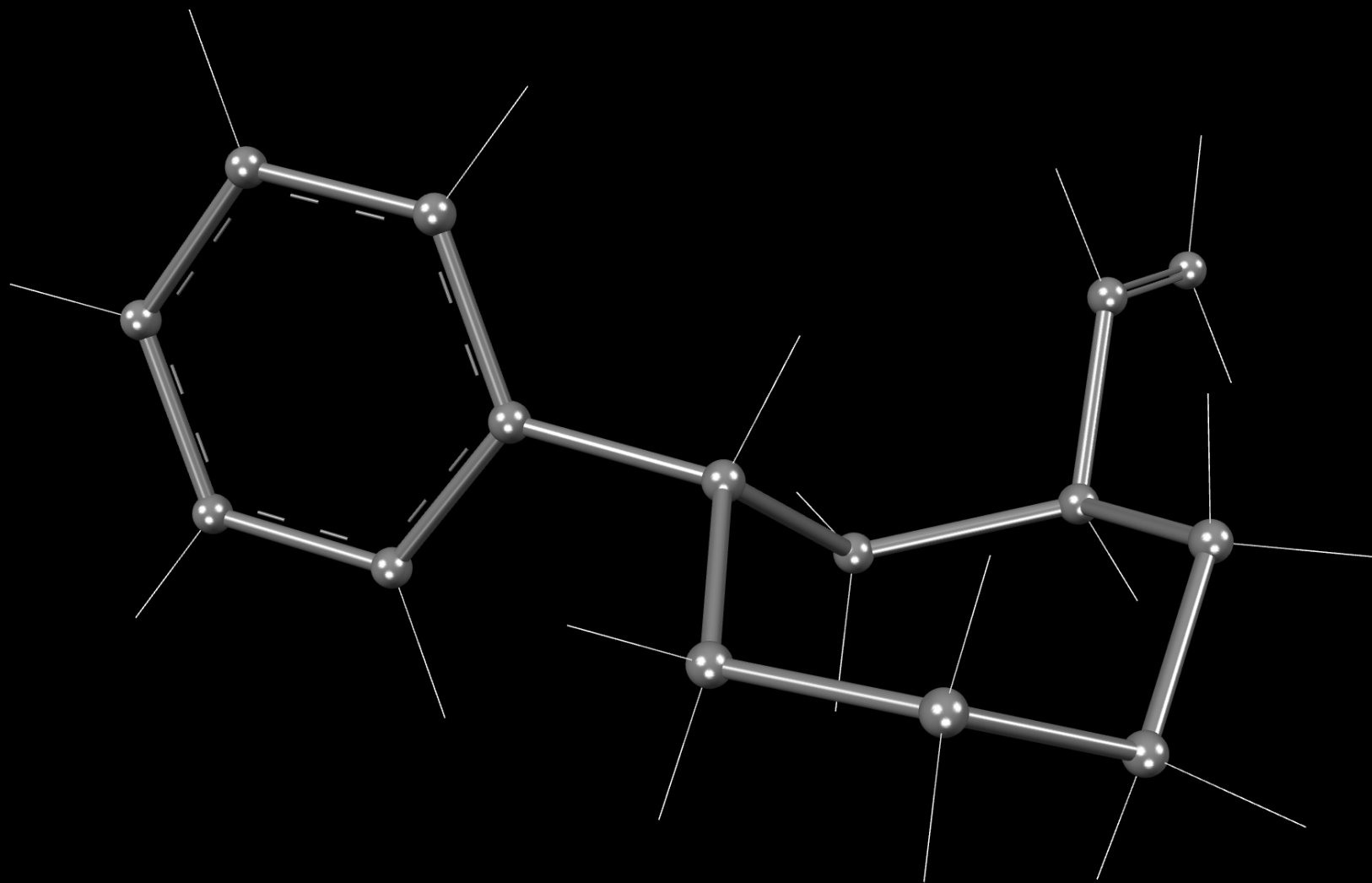
KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA (SAMO INFORMATIVNO)

Konformacija ciklododekana proračunata *ab initio* metodom. Kao i kod ostalih prstenova sa 7-13 C atoma, postoji veći broj konformacija slične energije, koje lako prelaze jedna u drugu. Nema posebno stabilnih konformacija. I najstabilnije konformacije imaju određeni sterni napon (konformacionu energiju), u poređenju sa acikličnim molekulom. Ima daleko manji sterni napon od cikloundekana. (Prstenovi sa ~14 i više C atoma praktično nemaju sterni napon).



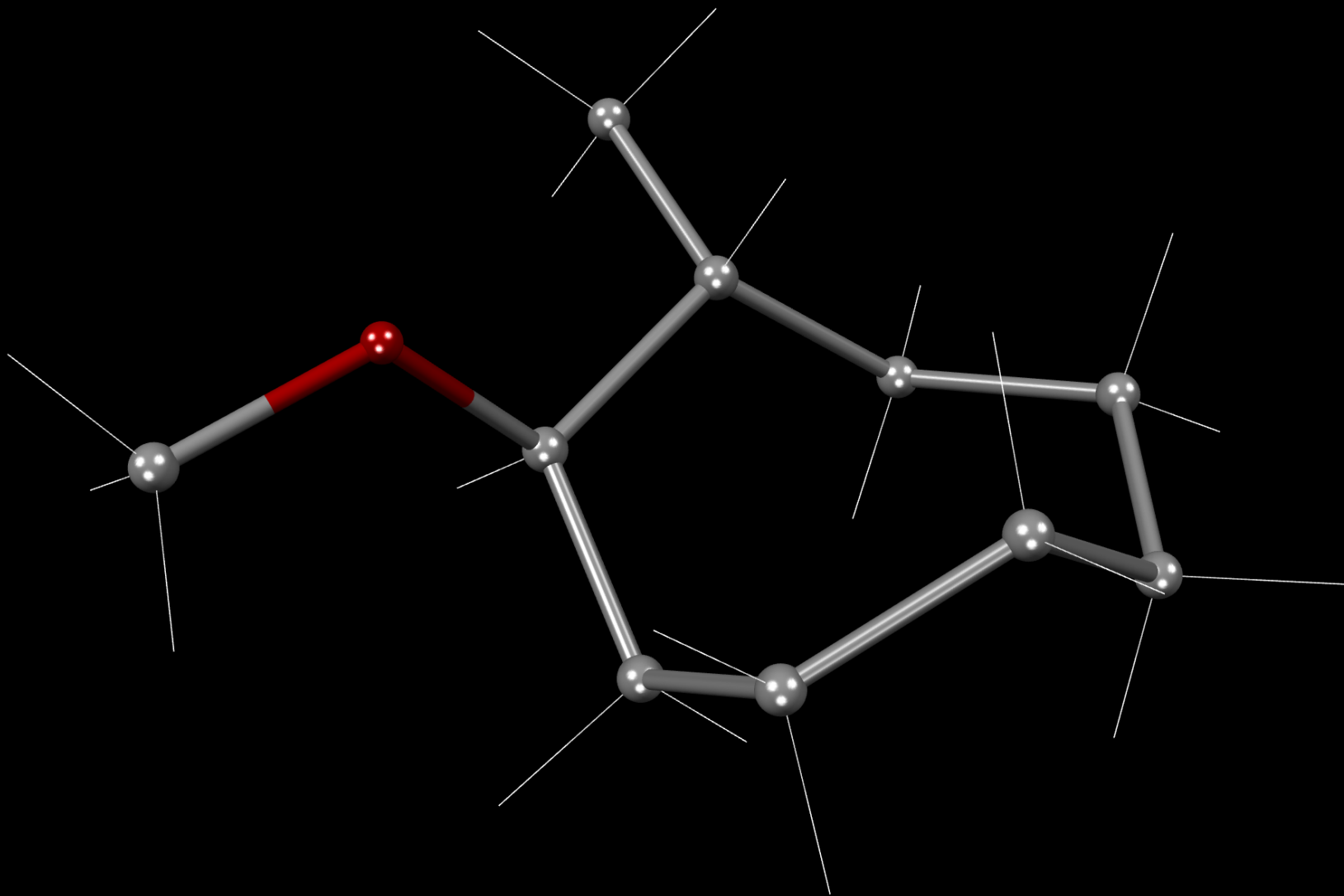
KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA - DODATNI PRIMERI (SAMO INFORMATIVNO)

Primeri prikazuju pojedine proračunate, relativno stabilne konformacije supstituisanih prstenova sa 7-12 C atoma. U priloženim fajlovima (C7_animacija.dsv do C12_animacija.dsv) nalazi se grupisan veći broj različitih, proračunatih konformacija, za svaki prikazani molekul. Ove konformacije mogu se reprodukovati kao animacija i predstavljaju grubu aproksimaciju kontinualne promene konformacije molekula u gasnoj ili tečnoj fazi.



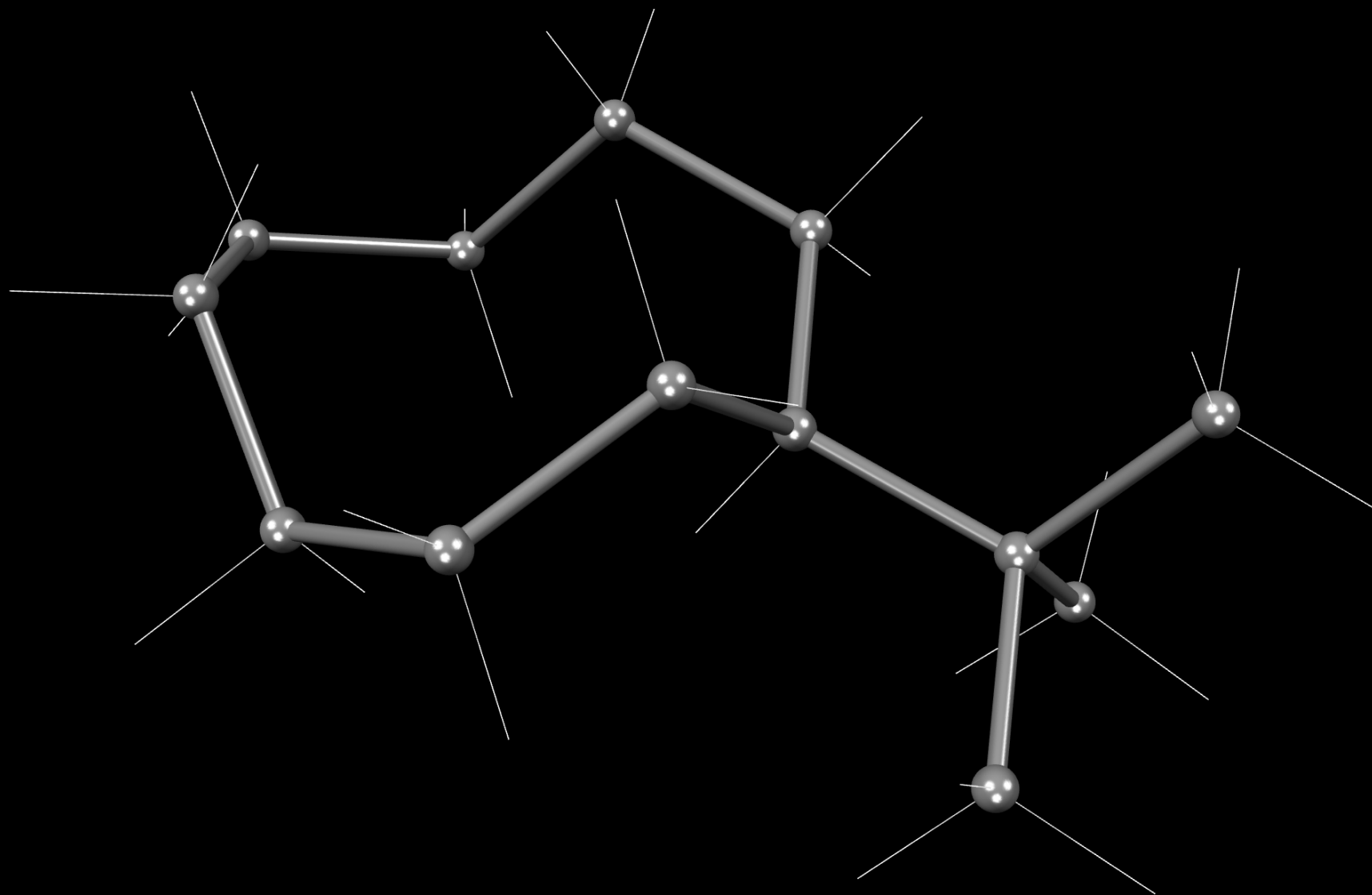
KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA - DODATNI PRIMERI (SAMO INFORMATIVNO)

Primeri prikazuju pojedine proračunate, relativno stabilne konformacije supstituisanih prstenova sa 7-12 C atoma. U priloženim fajlovima (C7_animacija.dsv do C12_animacija.dsv) nalazi se grupisan veći broj različitih, proračunatih konformacija, za svaki prikazani molekul. Ove konformacije mogu se reprodukovati kao animacija i predstavljaju grubu aproksimaciju kontinualne promene konformacije molekula u gasnoj ili tečnoj fazi.



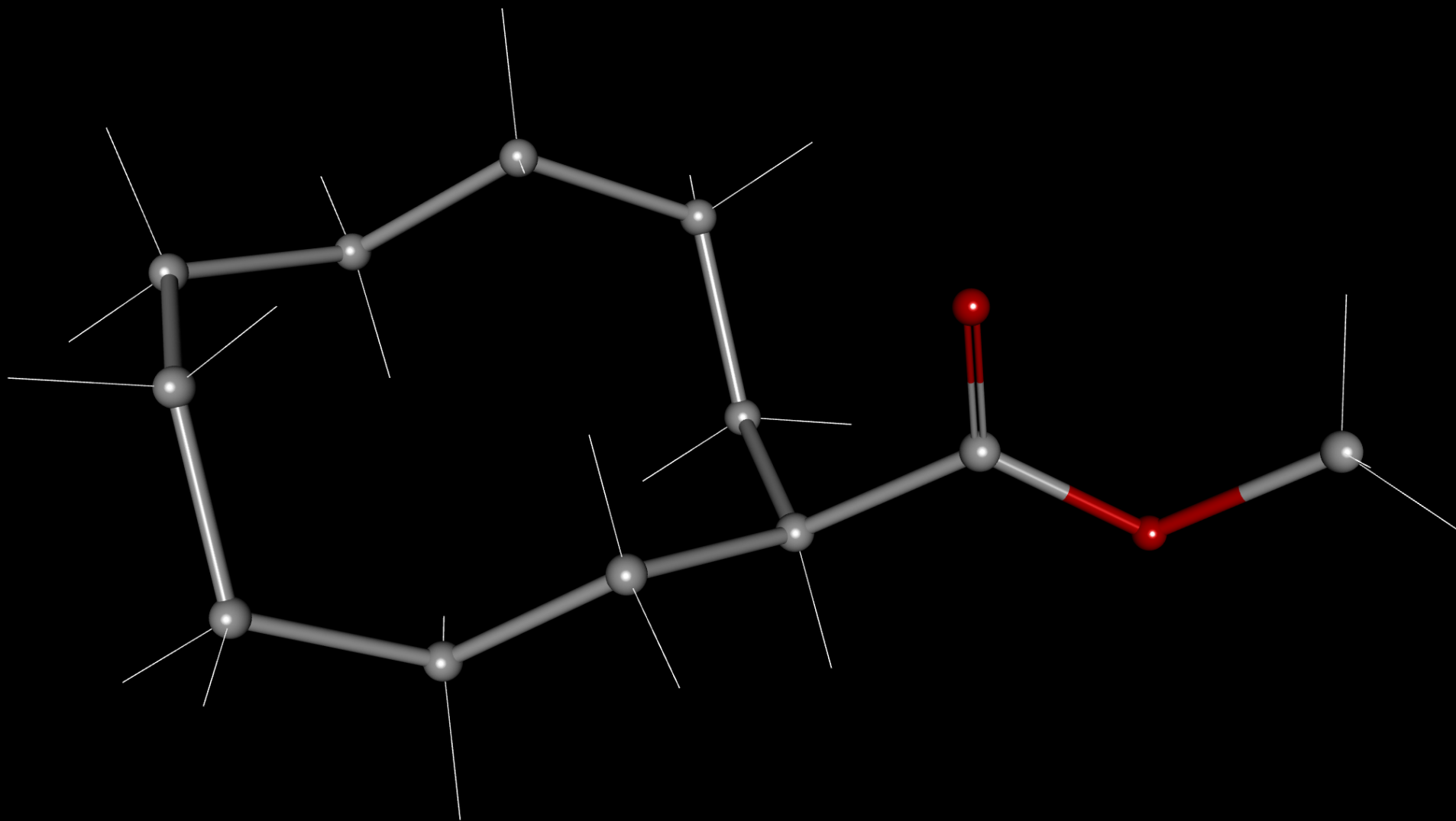
KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA - DODATNI PRIMERI (SAMO INFORMATIVNO)

Primeri prikazuju pojedine proračunate, relativno stabilne konformacije supstituisanih prstenova sa 7-12 C atoma. U priloženim fajlovima (C7_animacija.dsv do C12_animacija.dsv) nalazi se grupisan veći broj različitih, proračunatih konformacija, za svaki prikazani molekul. Ove konformacije mogu se reprodukovati kao animacija i predstavljaju grubu aproksimaciju kontinualne promene konformacije molekula u gasnoj ili tečnoj fazi.



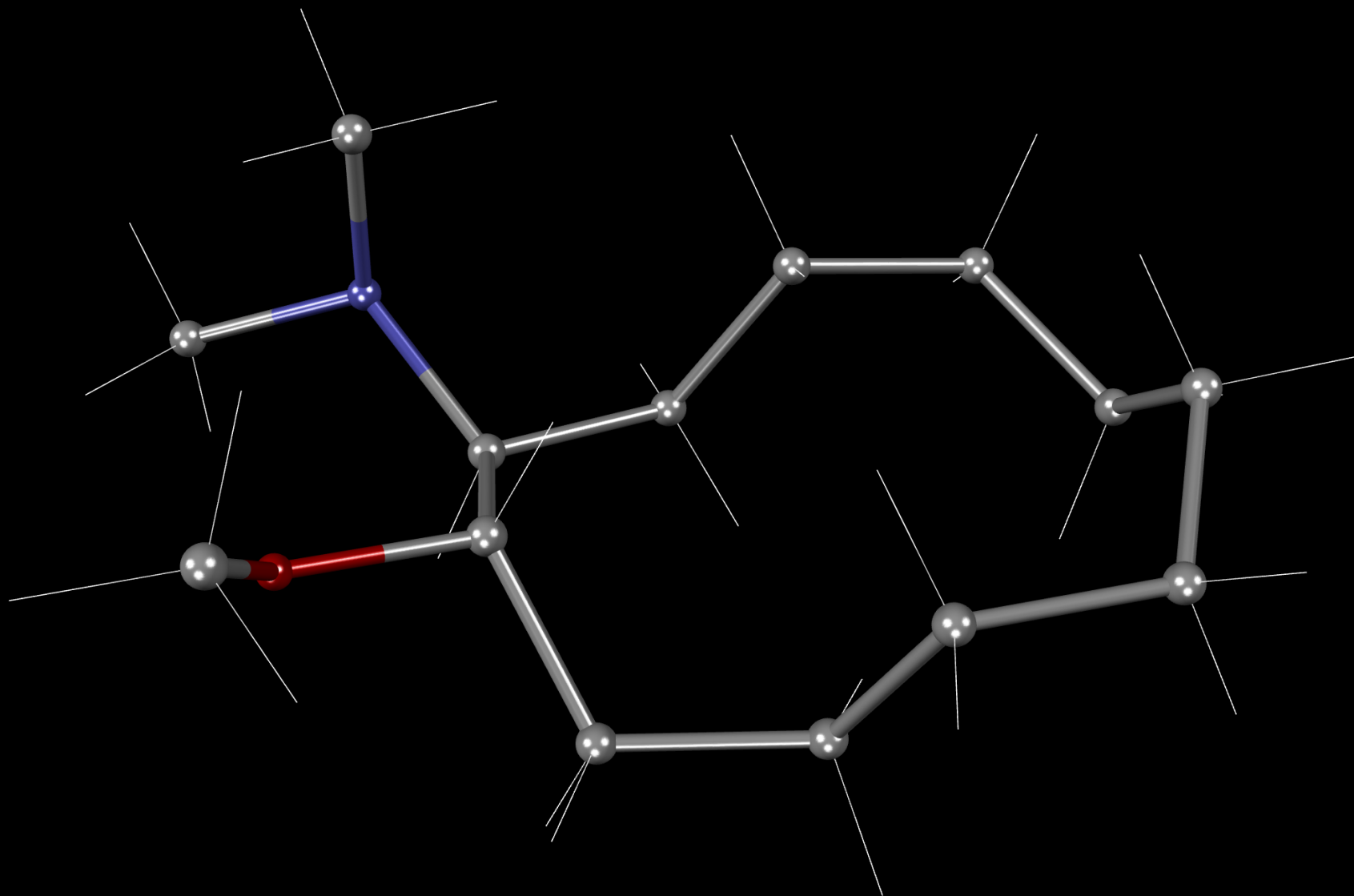
KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA - DODATNI PRIMERI (SAMO INFORMATIVNO)

Primeri prikazuju pojedine proračunate, relativno stabilne konformacije supstituisanih prstenova sa 7-12 C atoma. U priloženim fajlovima (C7_animacija.dsv do C12_animacija.dsv) nalazi se grupisan veći broj različitih, proračunatih konformacija, za svaki prikazani molekul. Ove konformacije mogu se reprodukovati kao animacija i predstavljaju grubu aproksimaciju kontinualne promene konformacije molekula u gasnoj ili tečnoj fazi.



KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA - DODATNI PRIMERI (SAMO INFORMATIVNO)

Primeri prikazuju pojedine proračunate, relativno stabilne konformacije supstituisanih prstenova sa 7-12 C atoma. U priloženim fajlovima (C7_animacija.dsv do C12_animacija.dsv) nalazi se grupisan veći broj različitih, proračunatih konformacija, za svaki prikazani molekul. Ove konformacije mogu se reprodukovati kao animacija i predstavljaju grubu aproksimaciju kontinualne promene konformacije molekula u gasnoj ili tečnoj fazi.



KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA - DODATNI PRIMERI (SAMO INFORMATIVNO)

Primeri prikazuju pojedine proračunate, relativno stabilne konformacije supstituisanih prstenova sa 7-12 C atoma. U priloženim fajlovima (C7_animacija.dsv do C12_animacija.dsv) nalazi se grupisan veći broj različitih, proračunatih konformacija, za svaki prikazani molekul. Ove konformacije mogu se reprodukovati kao animacija i predstavljaju grubu aproksimaciju kontinualne promene konformacije molekula u gasnoj ili tečnoj fazi.

