

KONFORMACIONA

ANALIZA

I DEO: ACIKLIČNI MOLEKULI

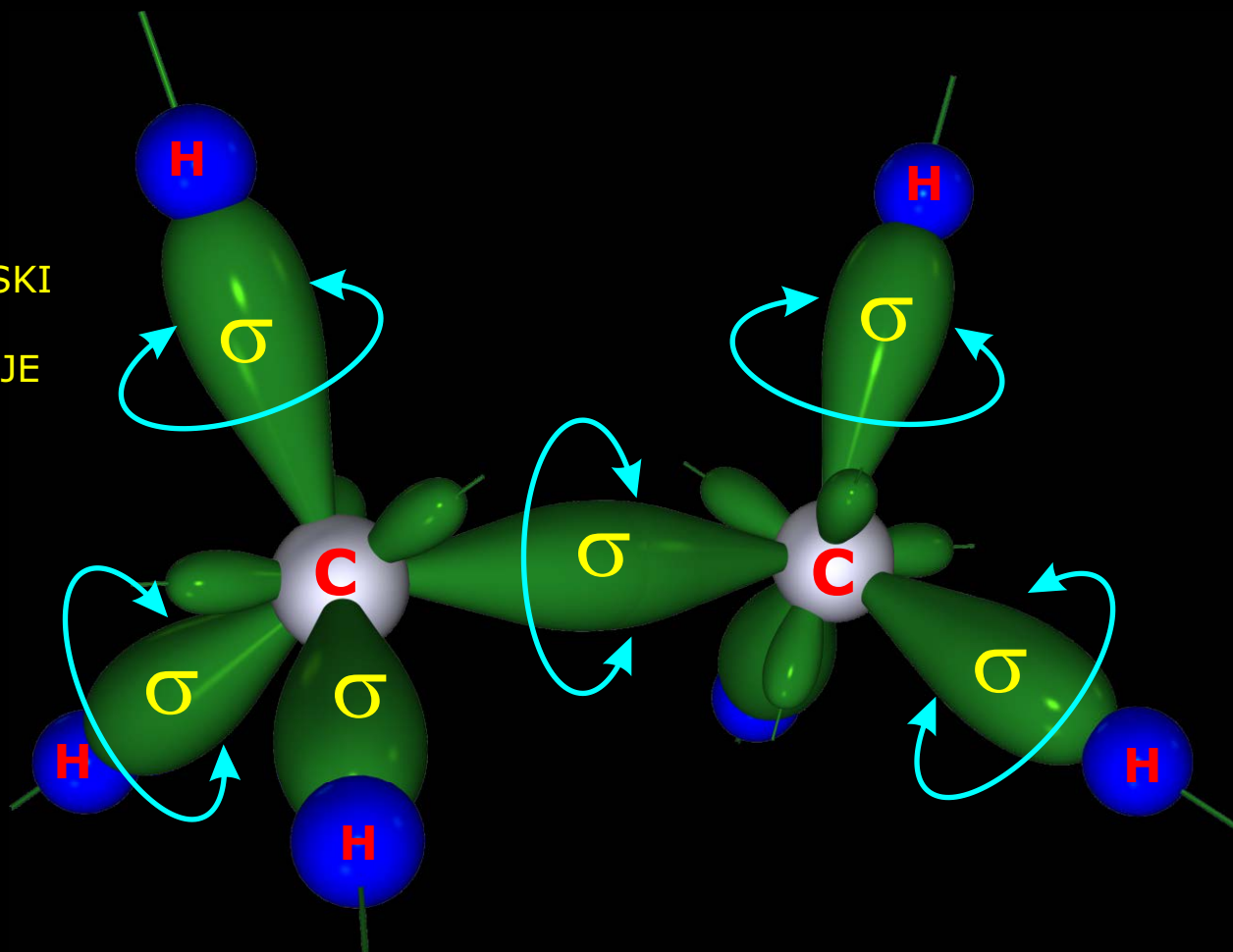
OKO JEDNOSTRUKIH (SIGMA) VEZA MOGUĆA
JE SLOBODNA ROTACIJA.

- DAKLE, VEZE KAO ŠTO SU **C-H**, **C-C**, **C-X**
(X= HALOGEN), **C-O**, **C-N**, **O-O**, **N-N** I DRUGE,
PONAŠAJU SE KAO "OSOVINE", OKO KOJIH SE

STALNO VRŠI SLOBODNA ROTACIJA.

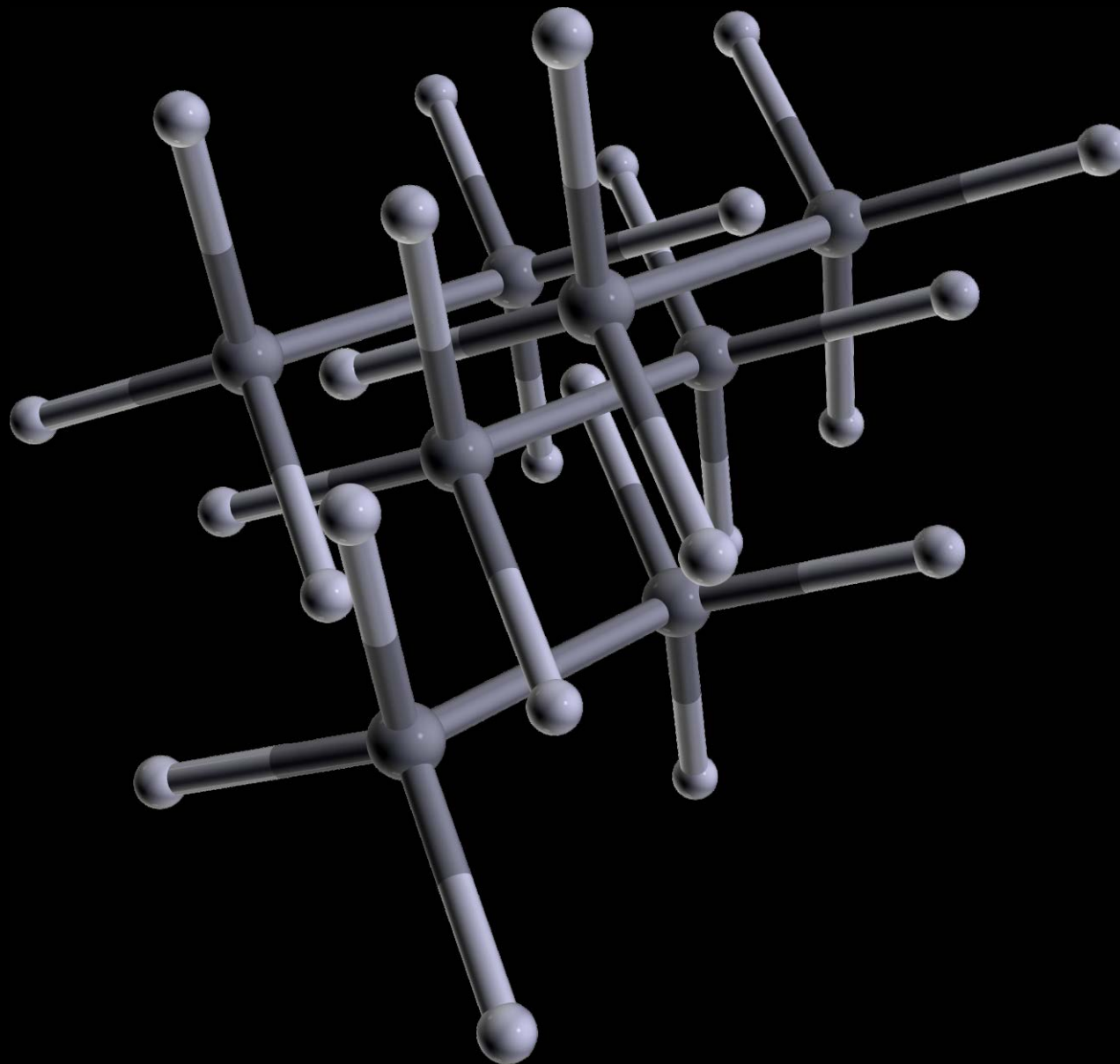
-USLOV ZA SLOBODNU ROTACIJU JESTE DA SE
MOLEKUL NALAZI U GASNOJ ILI TEČNOJ FAZI.

ETAN: SHEMATSKI
PRIKAZ ROTACIJE
OKO **C-H** I **C-C**
VEZA.



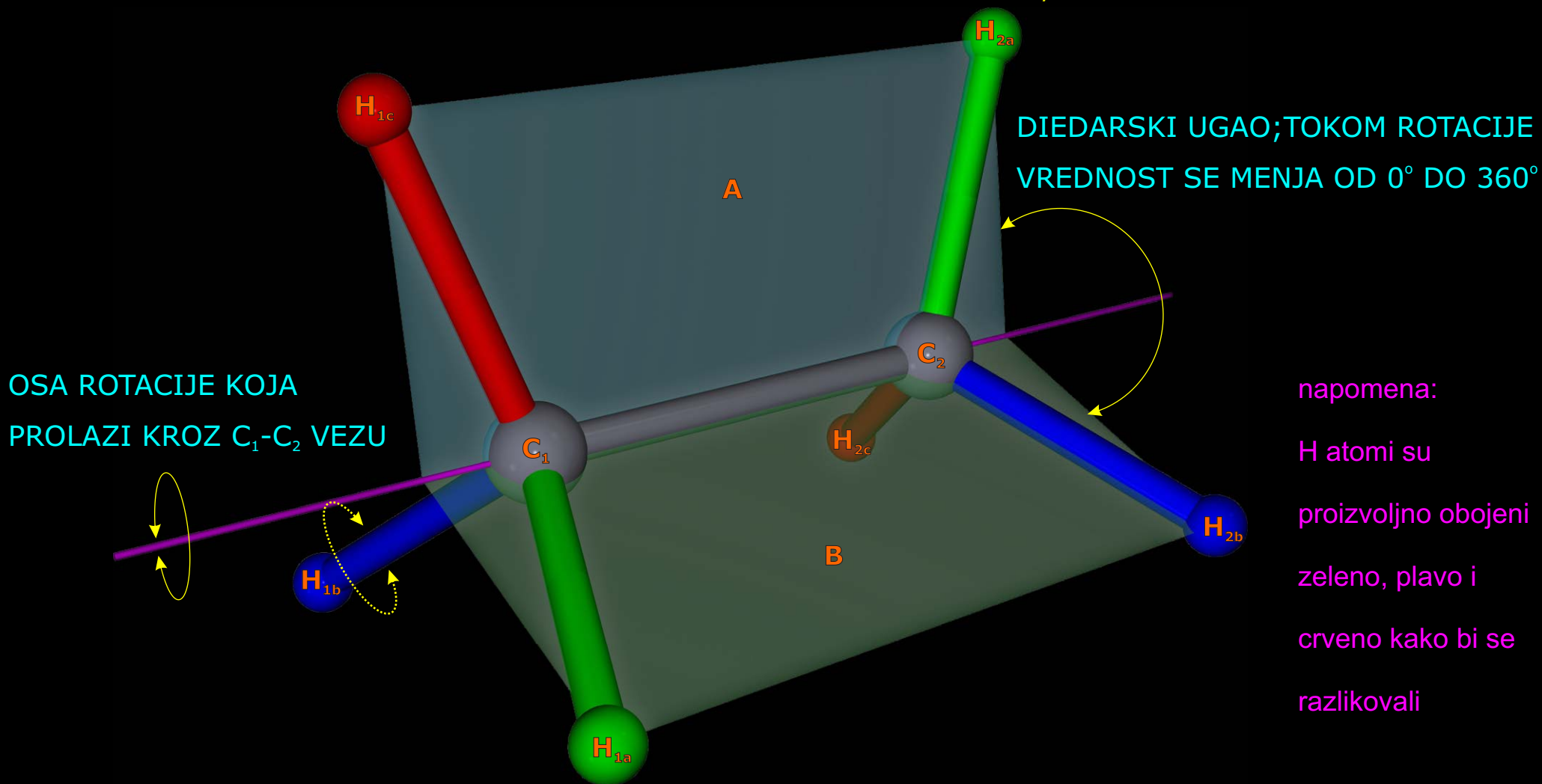
U ČVRSTOM STANJU SLOBODNA ROTACIJA NIJE MOGUĆA. MOLEKULI SU FIKSIRANI U KRISTALNOJ REŠETKI I JEDAN DRUGOME ONEMOGUĆAVAJU ROTACIJU I TRANASLACIJU BILO KOJE VRSTE.

POJEDNOSTAVLJENI PRIKAZ MOLEKULA ETANA U KRISTALNOJ REŠETKI (t.t. -183°C).



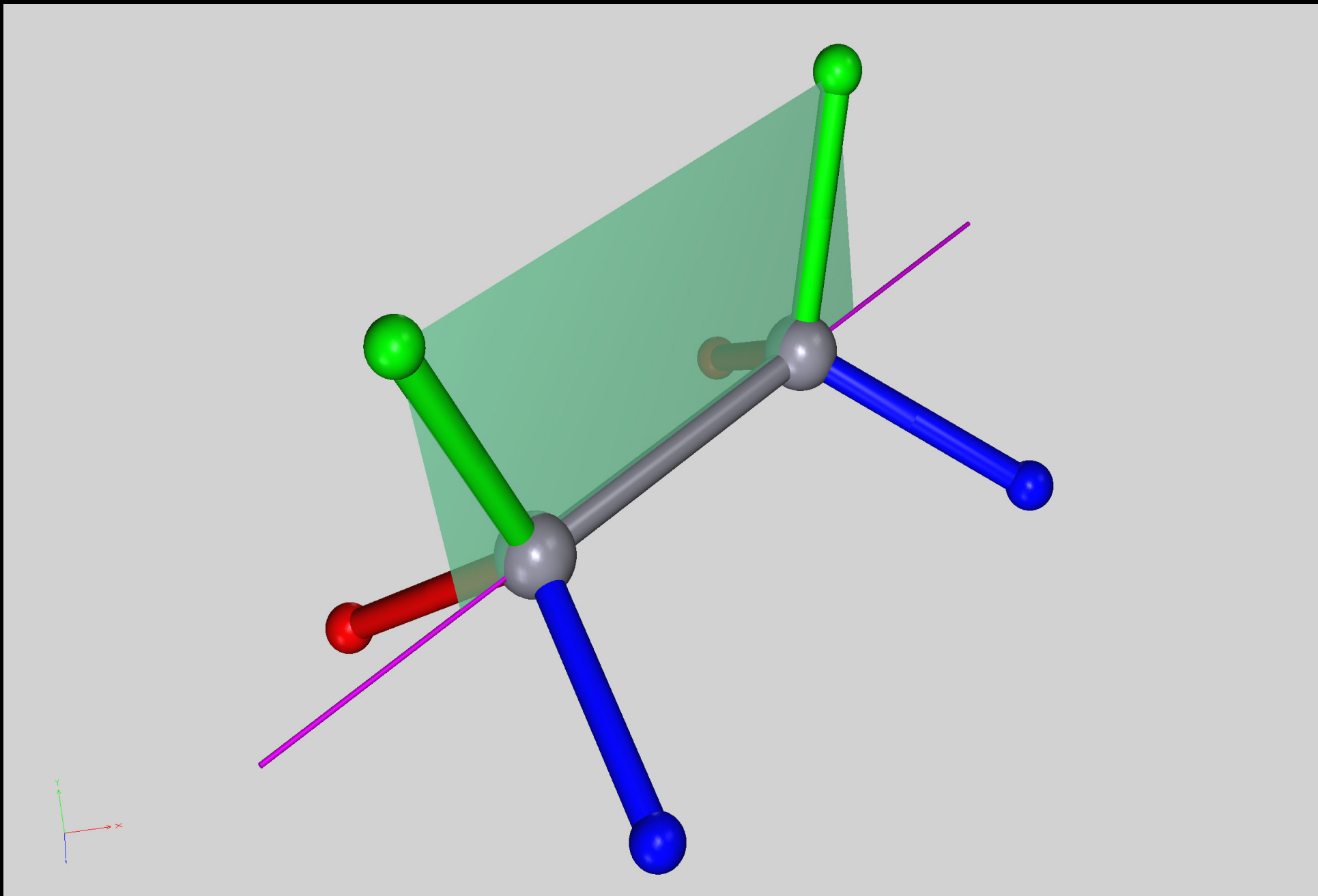
ETAN: SHEMATSKI PRIKAZ ROTACIJE OKO **C-H** I **C-C** VEZA.

PRIMER DIEDARSKOG UGLA: ZAKLAPAJU GA RAVNI A I B. RAVAN **A** DEFINIŠU ATOMI H_{1c} , C_1 I C_2 . RAVAN **B** JE "FIKSNA" I PROLAZI KROZ C_1 - C_2 VEZU. ROTACIJOM OKO C_1 - C_2 VEZE, MENJA SE OBLIK MOLEKULA KAO I NJEGOVA UKUPNA ENERGIJA. DIEDARSKI UGAO SE MENJA KONTINUALNO, OD 0° DO 360° .

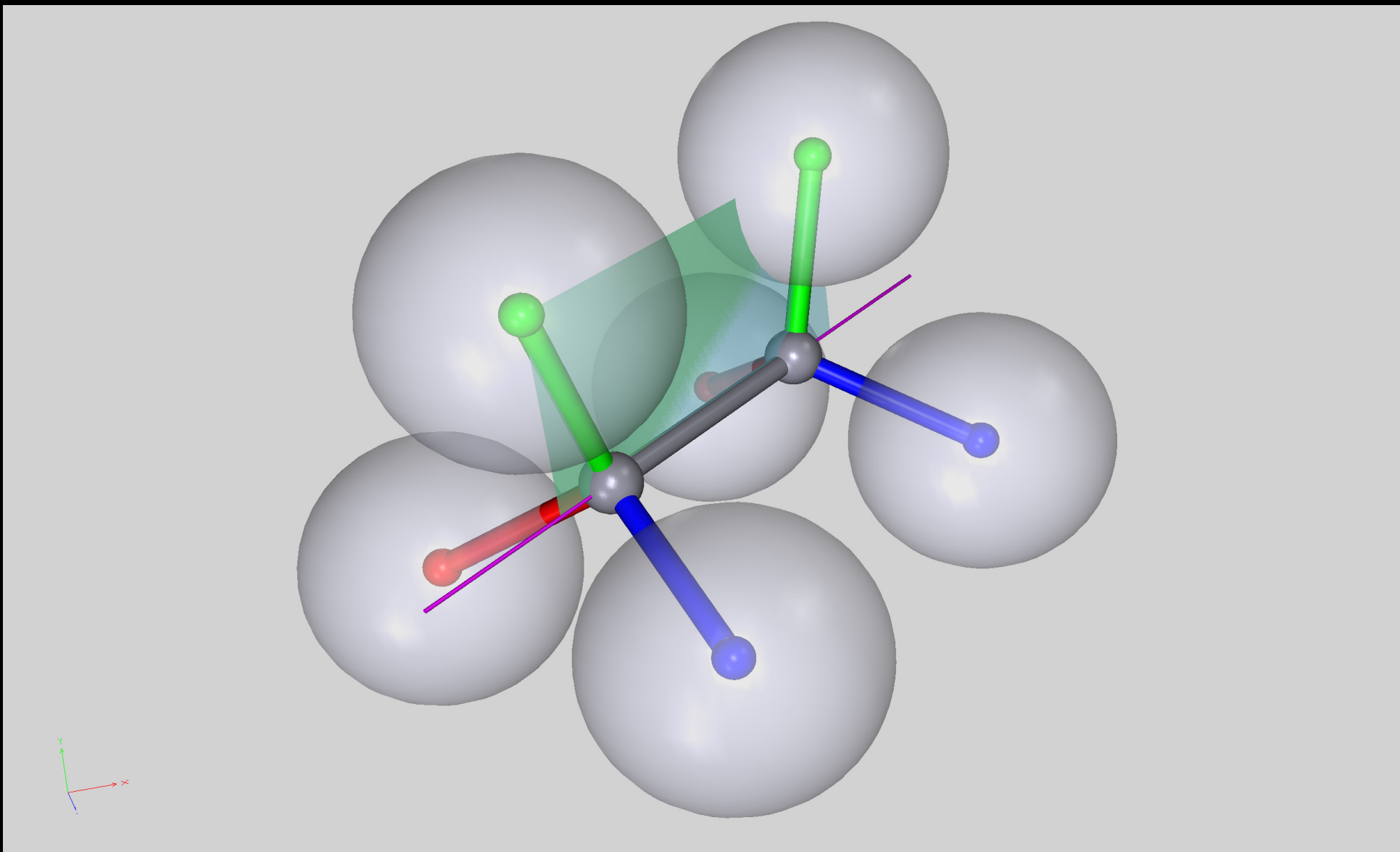


PORED ROTACIJE OKO C_1 - C_2 VEZE, DOLAZI I DO ROTACIJA OKO C-H VEZA. MEĐUTIM, OVE ROTACIJE NE MENJAJU OBLIK MOLEKULA I PRAKTIČNO SU "NEVIDLJIVE".

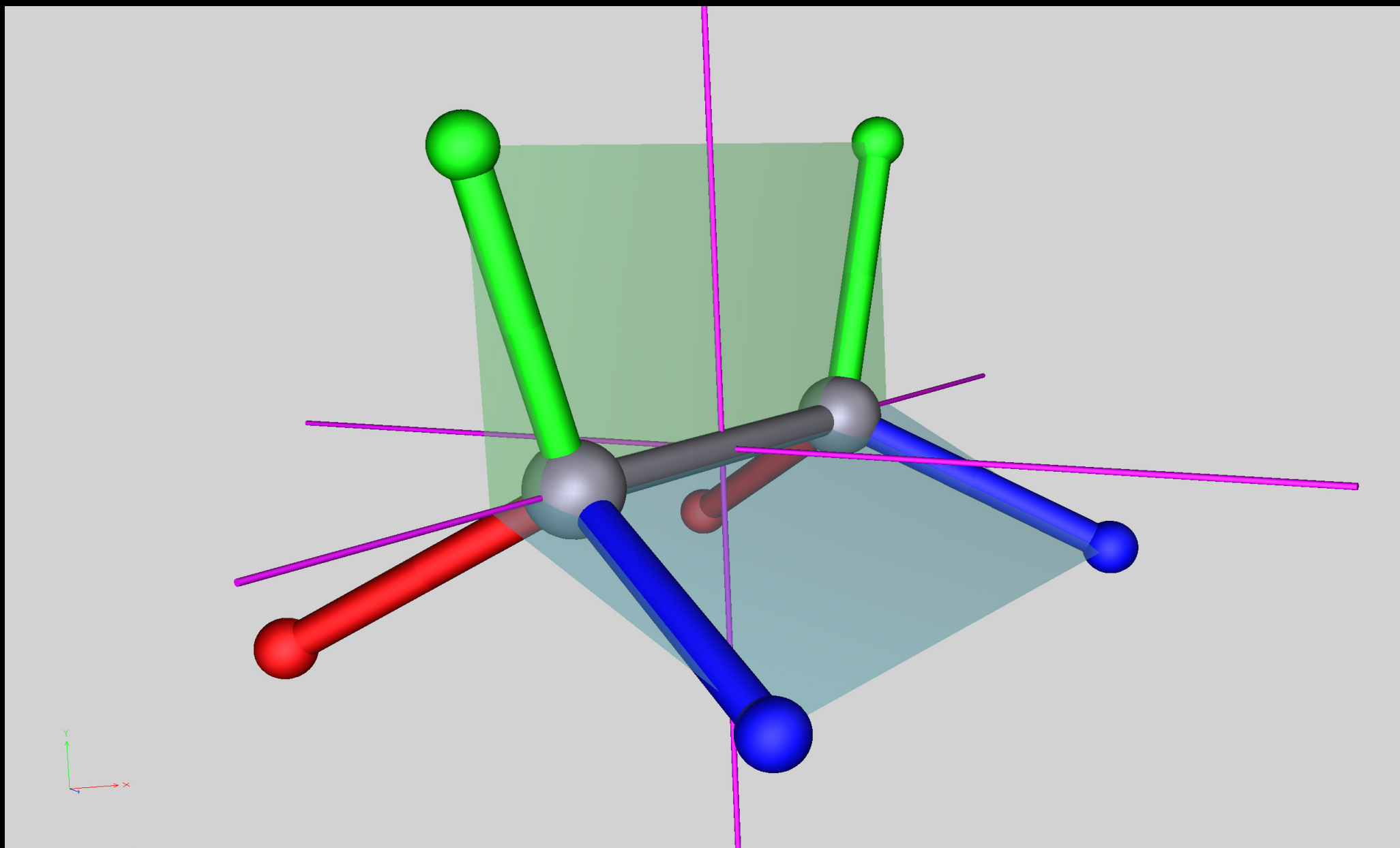
ETAN: ANIMIRANI PRIKAZ ROTACIJE OKO **C-C** VEZE. SVAKI OD BESKONAČNO MNOGO OBLIKA KOJI MOLEKUL ETANA ZAUZIMA TOKOM ROTACIJE, NAZIVA SE KONFORMACIJA.



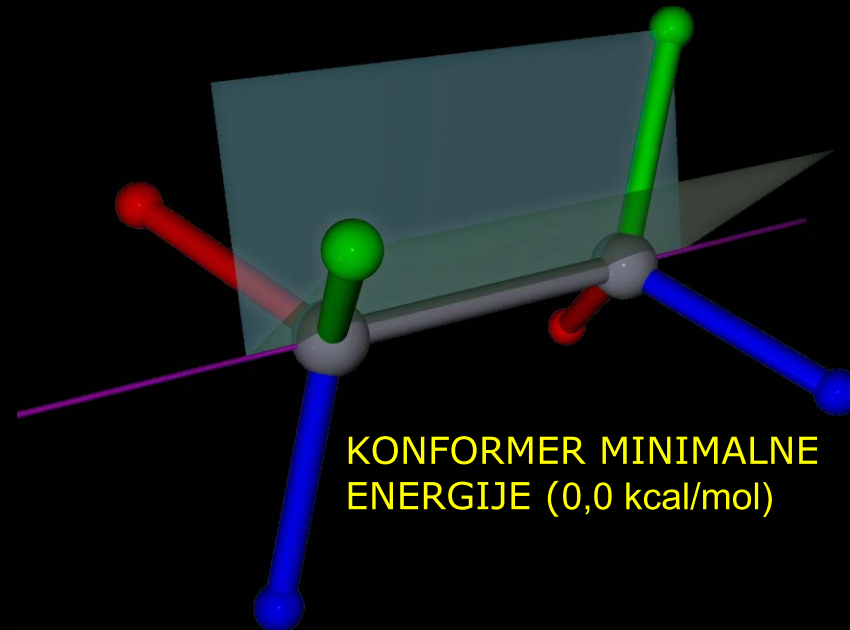
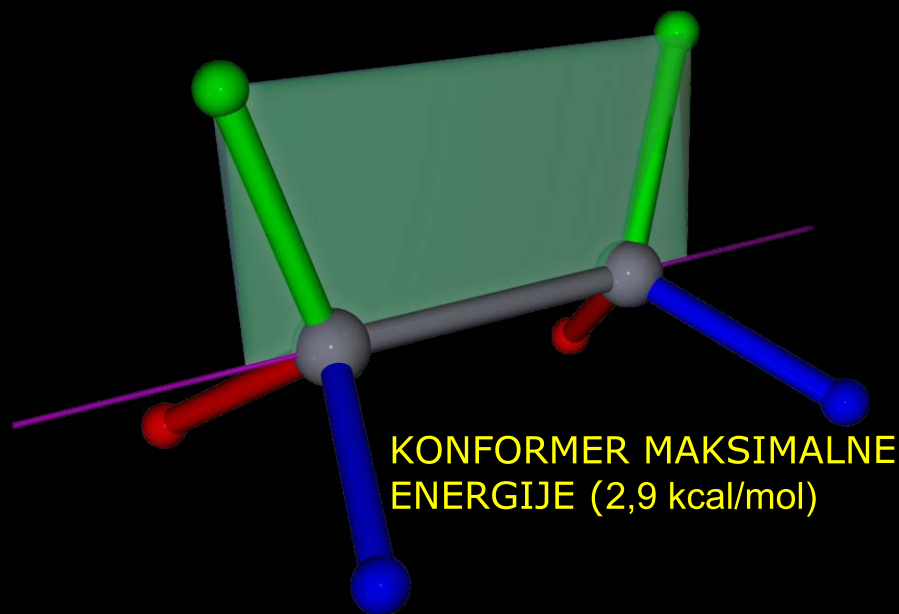
ETAN: ANIMIRANI PRIKAZ ROTACIJE OKO **C-C** VEZE. RAZLIČITE KONFORMACIJE IMAJU RAZLIČITU ENERGIJU. PROZIRNE SFERE PRIBLIŽNO PRIKAZUJU "ZONE UTICAJA" POJEDINIH H ATOMA. ŠTO SU SFERE MEĐUSOBNO BLIŽE, TO JE ODBIJANJE VEĆE. NAJVEĆE ODBIJANJE ODGOVARA NAJVIŠOJ ENERGIJI DATOG KONFORMERA, A NAJMANJE ODBIJANJE NAJNIŽOJ ENERGIJI DATOG KONFORMERA.



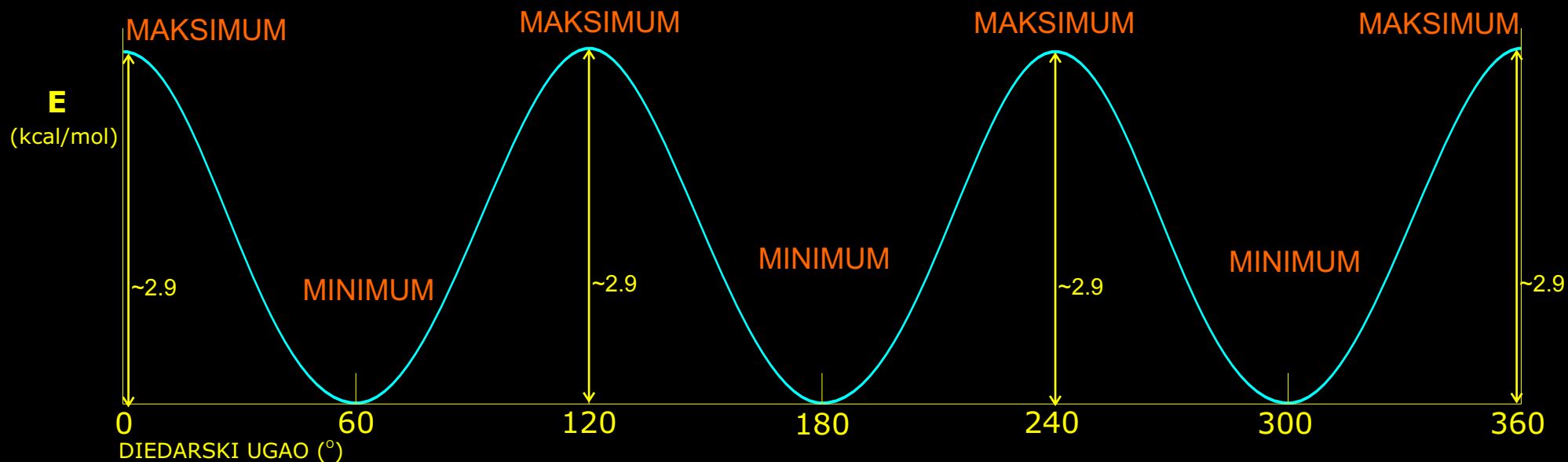
ETAN: ANIMIRANI PRIKAZ ROTACIJE OKO **C-C** VEZE. PORED ROTACIJE OKO **C-C** VEZE, MOLEKUL ETANA ROTIRA I KAO CELINA U PROSTORU, OKO NEOGRANIČENO MNOGO OSA. (KRAJNJE POJEDNOSTAVLJENI PRIKAZ, SA X,Y,Z KOORDINACIONIM SISTEMOM U CENTRU MOLEKULA).



ETAN: ENERGETSKI DIJAGRAM ROTACIJE OKO C-C VEZE KAO FUNKCIJA DIEDARSKOG UGLA. VREDNOSTI SE ODNOSI ISKLJUČIVO NA KONFORMACIJU ENERGIJU DATOG KONFORMERA, A NE NA UKUPNU ENERGIJU MOLEKULA. PROMENA ENERGIJE JE KONTINUALNA I PRATI SINUSOIDNU KRIVU. PRIKAZANE SU SAMO GRANIČNE VREDNOSTI: MINIMALNA (0,0 kcal/mol) I MAKSIMALNA (2,9 kcal/mol).



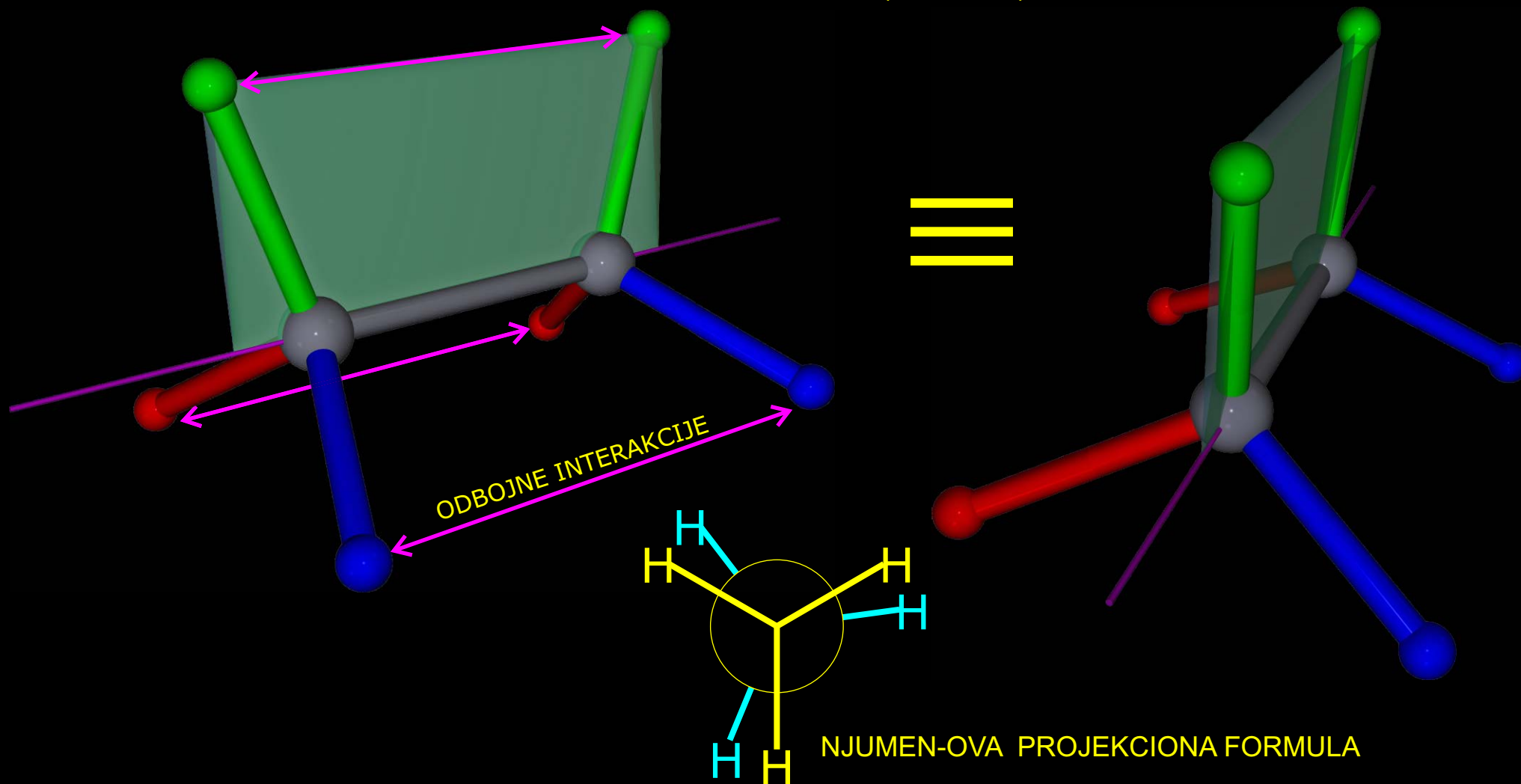
KRIVA KONFORMACIONE ENERGIJE (NIJE PRIKAZANA U SRAZMERI)



ETAN: KONFORMER MAKSIMALNE ENERGIJE, (2,9 kcal/mol), PRIKAZAN U DVE PROJEKCIJE. OVAJ KONFORMER JE NAJ-NESTABILNIJI ZBOG ODBOJNIH INTERAKCIJA IZMEĐU SUSEDNIH ATOMA VODNIKA (PRIKAZANIH STRELICAMA). OVAKVI KONFORMERI, GDE SU SUSEDNI ATOMI ORIJENTISANI DIREKTNO JEDAN NASPRAM DRUGOG, OZNAČAVAJU SE KAO **EKLIPSNI**.

PO KONVENCIJI, UZIMA SE DA JE VREDNOST DIEDARSKOG UGLA=0°.

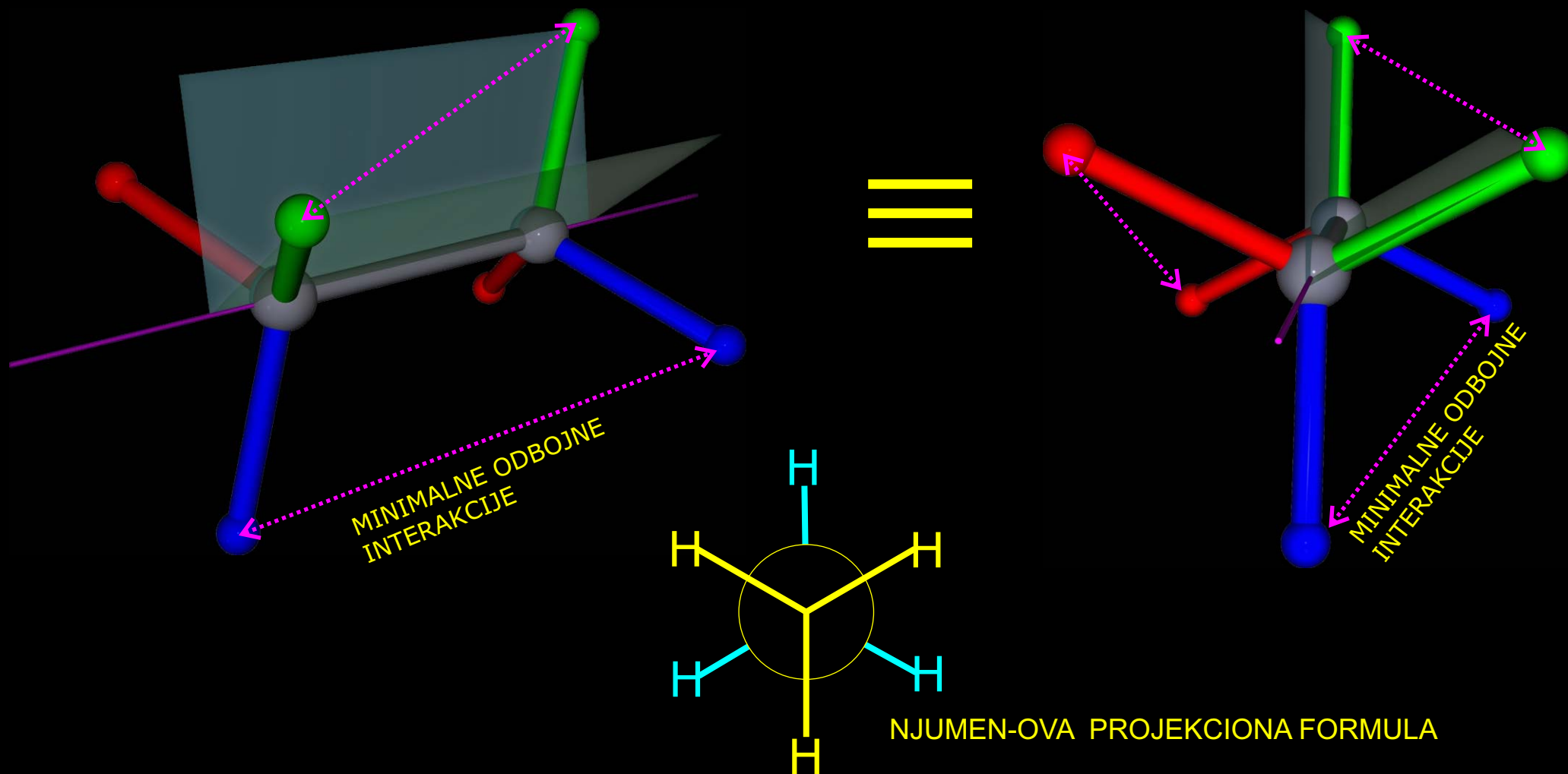
ZA NJIHOVO PRIKAZIVANJE TAKOĐE SE KORISTE NJUMEN-OVE (NEWMAN) PROJEKCIONE FORMULE.



ETAN: KONFORMER MINIMALNE ENERGIJE, (0,0 kcal/mol), PRIKAZAN U DVE PROJEKCIJE. OVAJ KONFORMER JE NAJ-STABILNIJI ZBOG ODSUSTVA ODBOJNIH INTERAKCIJA IZMEĐU SUSEDNIH ATOMA VODNIKA. TAKVI KONFORMERI, GDE SU SUSEDNI ATOMI ORIJENTISANI STEPENIČASTO JEDAN NASPRAM DRUGOG, OZNAČAVAJU SE KAO KOSI ILI STEPENIČASTI.

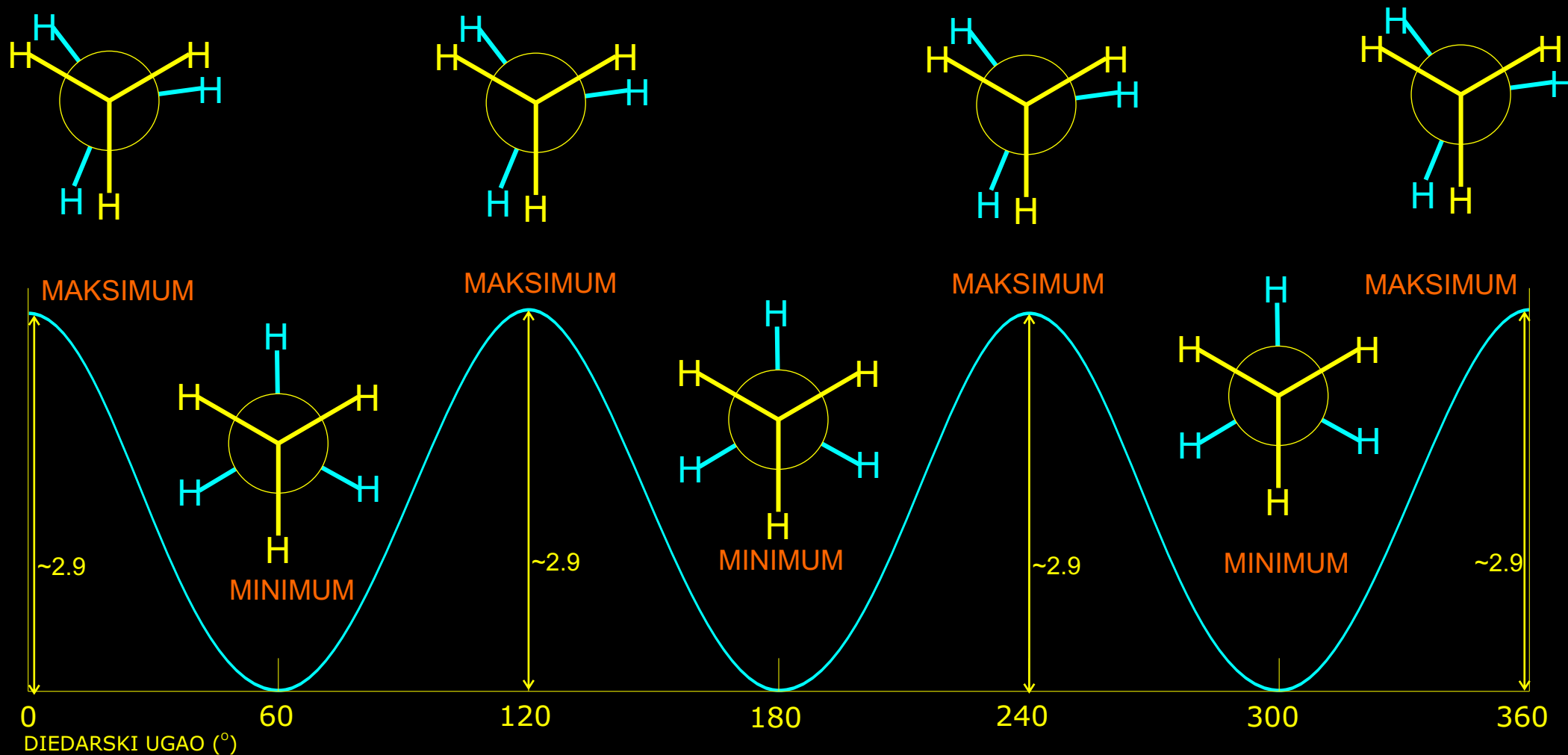
PO KONVENCIJI, UZIMA SE DA JE VREDNOST DIEDARSKOG UGLA=60°.

ZA NJIHOVO PRIKAZIVANJE TAKOĐE SE KORISTE NJUMEN-OVE (NEWMAN) PROJEKCIONE FORMULE.

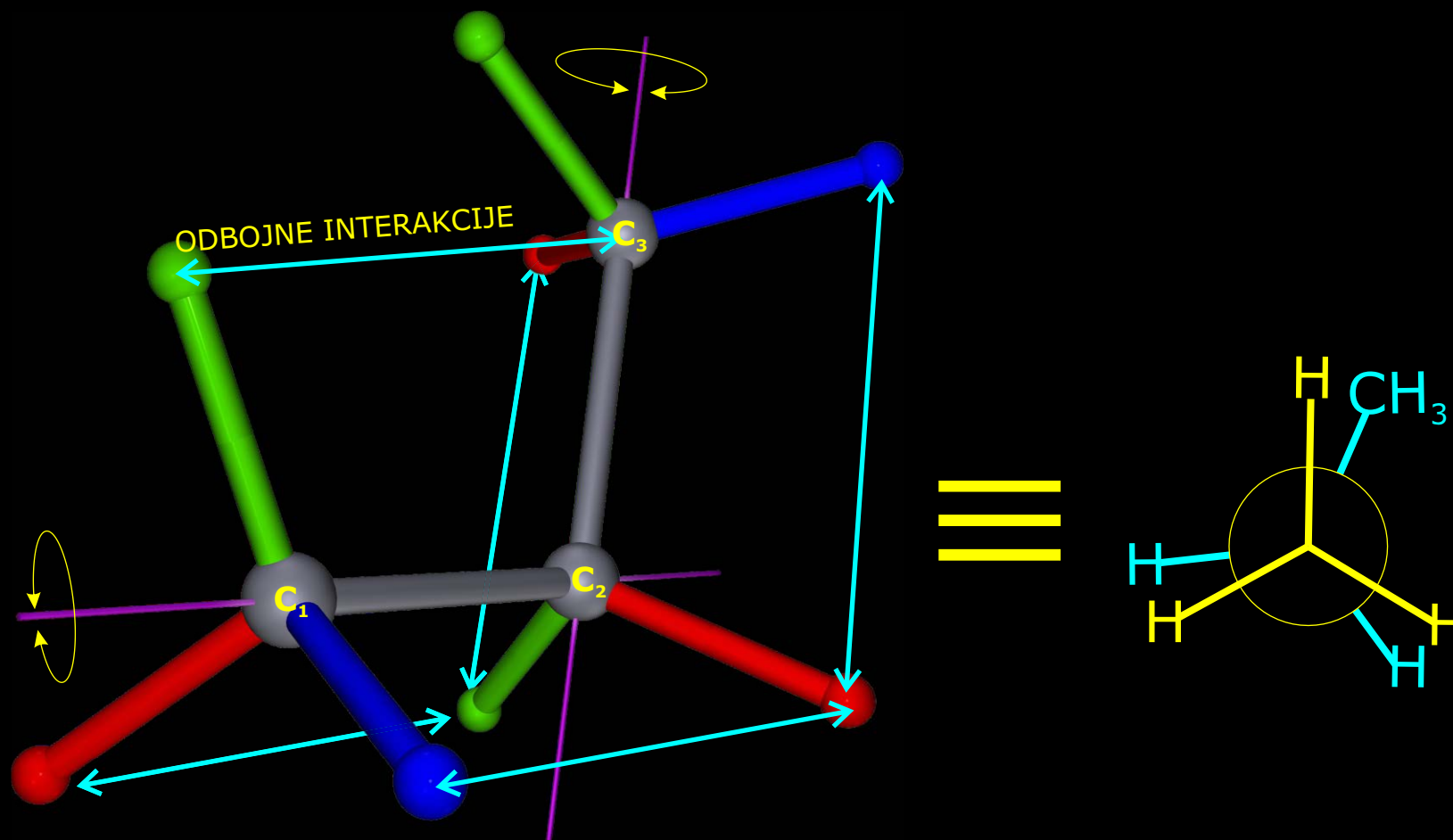


ETAN: ENERGETSKI DIJAGRAM JE IDENTIČAN PRETHODNOM. MINIMUMI I MAKSIMUMI OZNAČENI SU NJUMANOVIM PROJECIONIM FORMULAMA

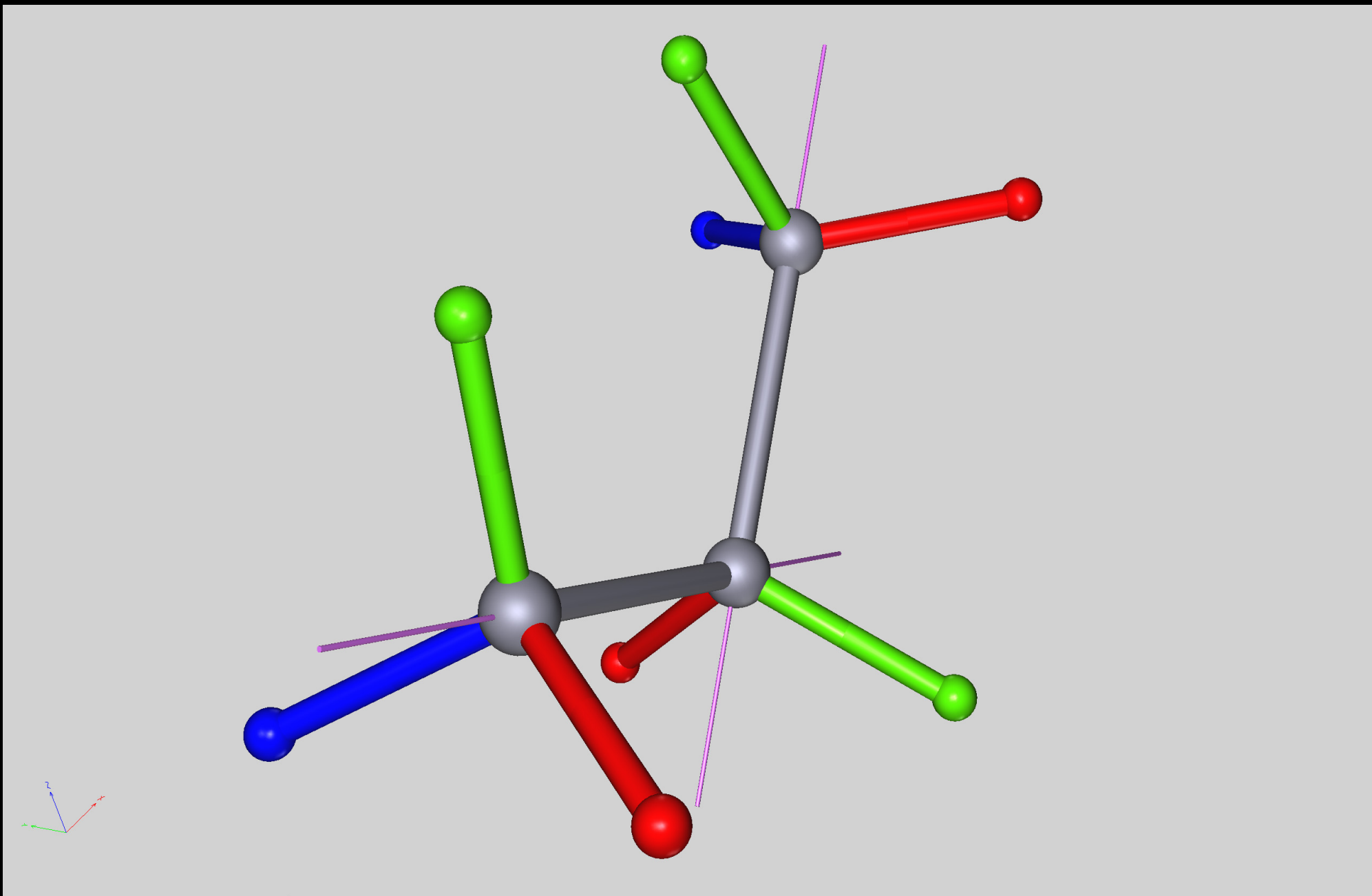
KRIVA KONFORMACIONE ENERGIJE (NIJE PRIKAZANA U SRAZMERI)



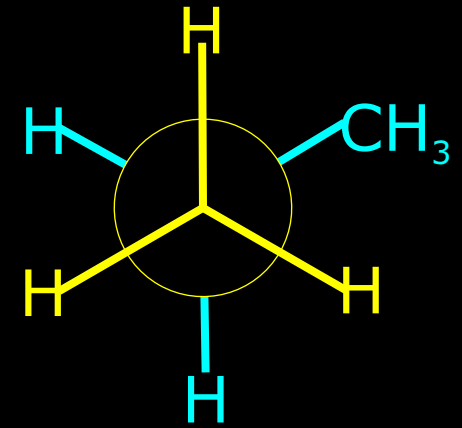
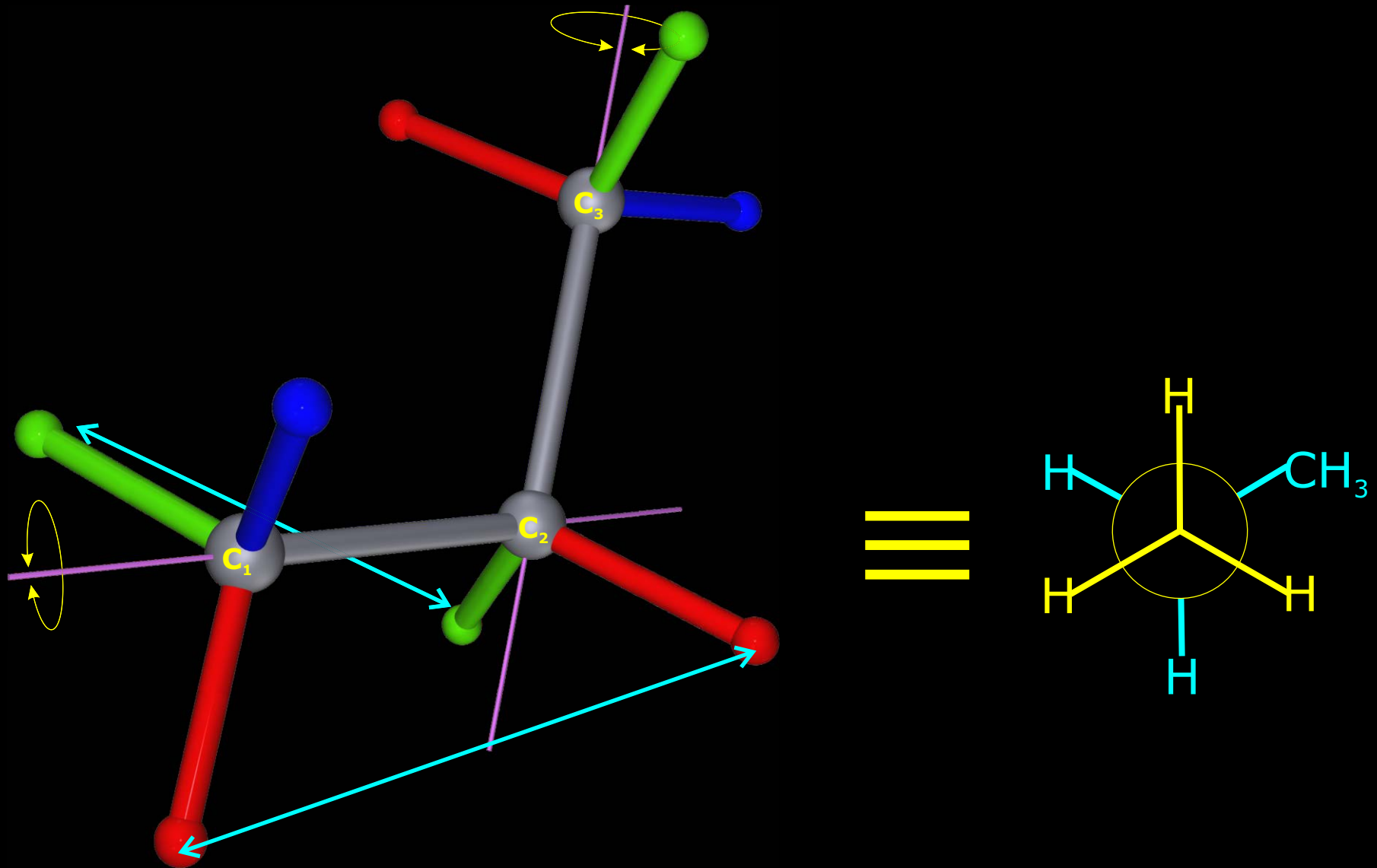
PROPAN: KONFORMER MAKSIMALNE ENERGIJE, (3,2 kcal/mol), PRIKAZAN U JEDNOJ PROJEKCIJI. OVAJ KONFORMER JE NAJ-NESTABILNIJI ZBOG ODBOJNIH INTERAKCIJA IZMEĐU SUSEDNIH ATOMA VODNIKA ODN. UGLJENIKA (PRIKAZANIH STRELICAMA). MOLEKUL PROPANA IMA DVE MOGUĆE OSE ROTACIJE (C_1-C_2 I C_2-C_3). TAKOĐE IMA I DVA *RELEVANTNA* DIEDARSKA UGLA (KOD ETANA POSTOJI JEDAN *RELEVANTAN* DIEDARSKI UGAO).



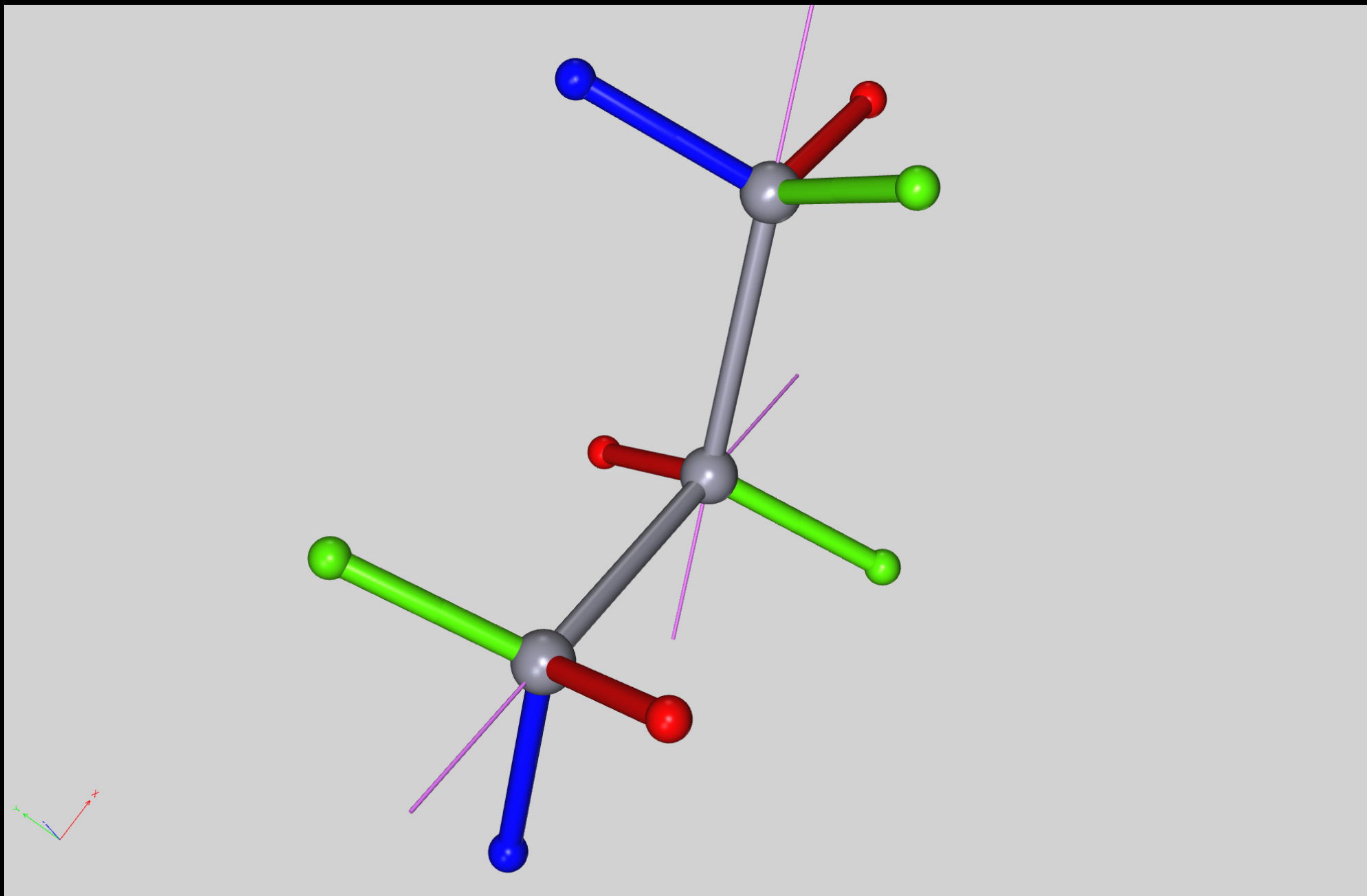
PROPAN: **3D** PRIKAZ KONFORMERA SA PRETHODNE STRANE (DIEDARSKI UGAO=0°; 3,2 kcal/mol); EKLIPSNA KONFORMACIJA



PROPAN: KONFORMER MINIMALNE ENERGIJE, (0,0 kcal/mol), PRIKAZAN U JEDNOJ PROJEKCIJI. OVAJ KONFORMER JE NAJ-STABILNIJI ZBOG MINIMALNIH ODBOJNIH INTERAKCIJA IZMEĐU SUSEDNIH ATOMA VODNIKA ODN. UGLJENIKA (PRIKAZANIH STRELICAMA).

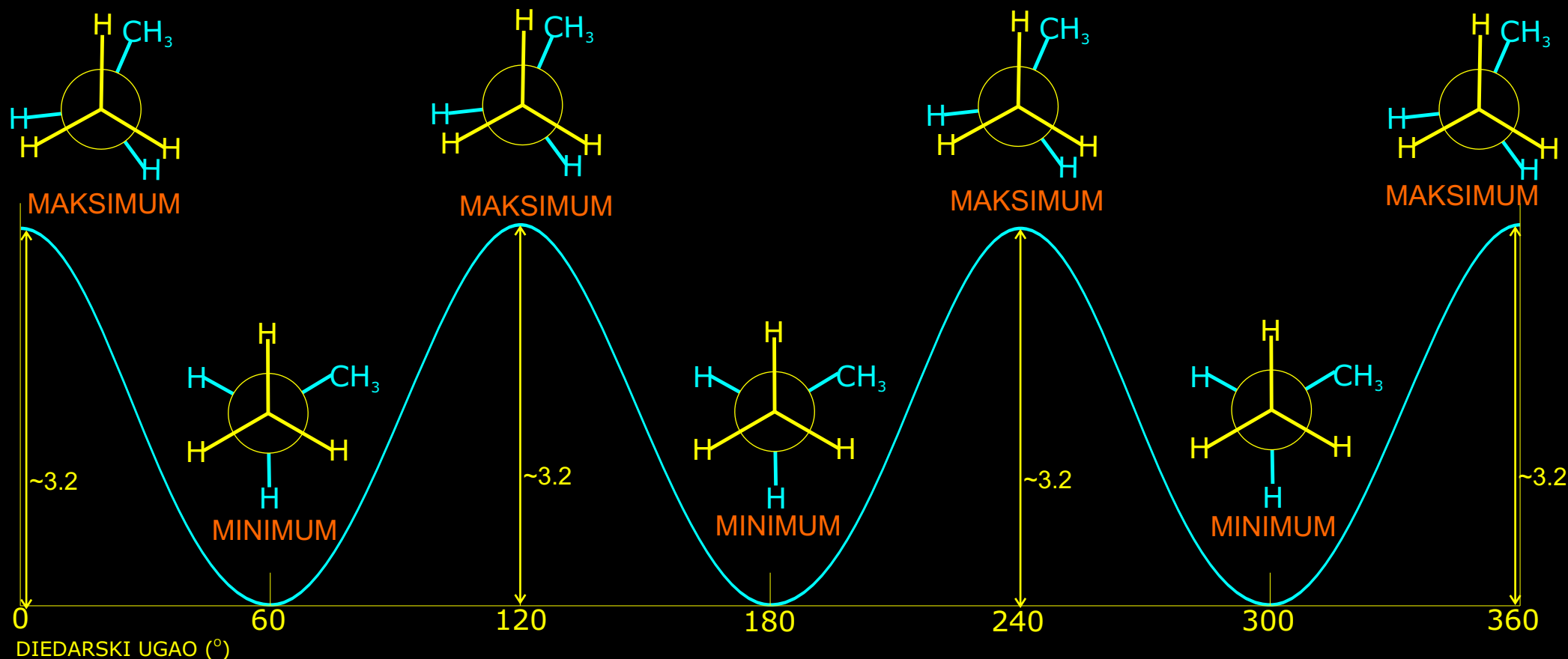


PROPAN: **3D** PRIKAZ KONFORMERA SA PRETHODNE STRANE (DIEDARSKI UGAO=60°;0,0 kcal/mol); KOSA KONFORMACIJA

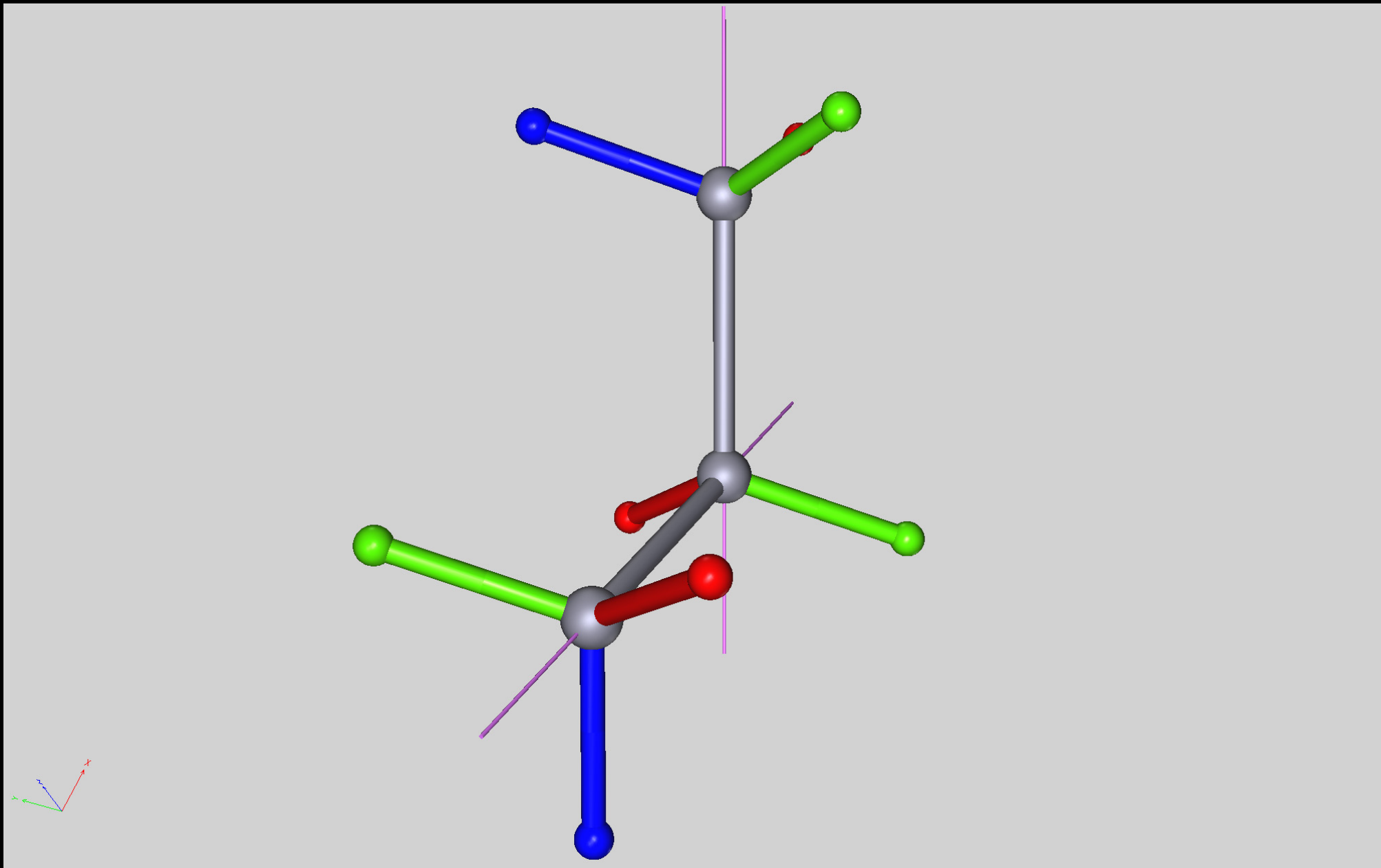


PROPAN: ENERGETSKI DIJAGRAM ROTACIJE OKO **JEDNE** C-C VEZE KAO FUNKCIJA DIEDARSKOG UGLA. VREDNOSTI SE ODOSE ISKLJUČIVO NA KONFORMACIONU ENERGIJU DATOG KONFORMERA, A NE NA UKUPNU ENERGIJU MOLEKULA. PROMENA ENERGIJE JE KONTINUALNA I PRATI SINUSOIDNU KRIVU KOJA IZGLEDA ISTO KAO KOD ETANA. PRIKAZANE SU SAMO GRANIČNE VREDNOSTI: MINIMALNA (0,0 kcal/mol) I MAKSIMALNA (3,2 kcal/mol).

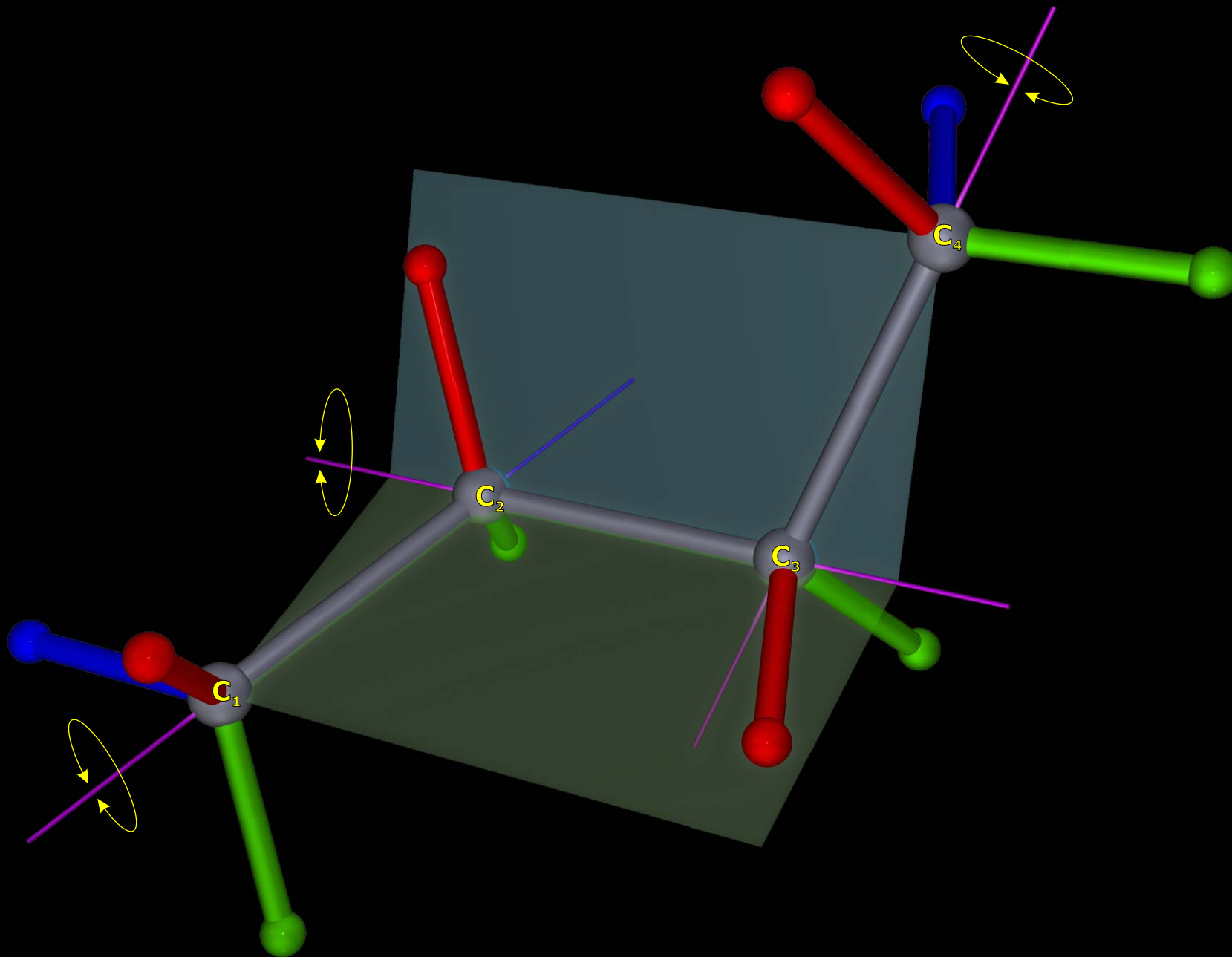
KRIVA KONFORMACIONE ENERGIJE PROPANA (NIJE PRIKAZANA U SRAZMERI)



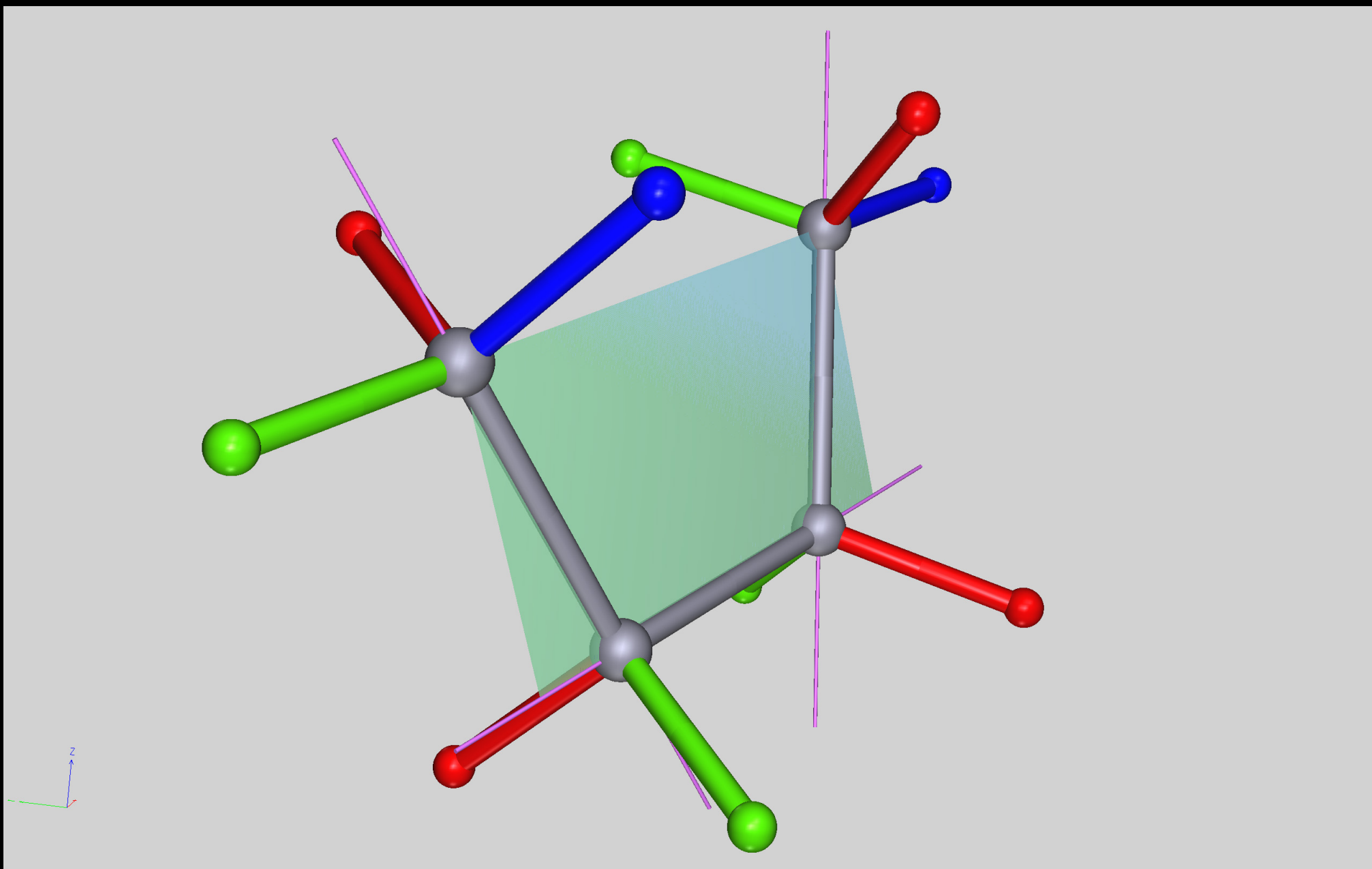
ANIMIRANI PRIKAZ SIMULTANE ROTACIJE MOLEKULA PROPANA OKO 2 OSE (2 C-C VEZE)



BUTAN: IMA TRI RELEVANTNE OSE ROTACIJE: C_1-C_2 , C_2-C_3 I C_3-C_4 . ZA KONFORMACIONU ANALIZU NAJZNAČAJNIJA JE OSA C_2-C_3 . (ROTACIJE OKO OSA C_1-C_2 I C_3-C_4 DAJU ISTU KRIVU KAO ETAN I PROPAN)

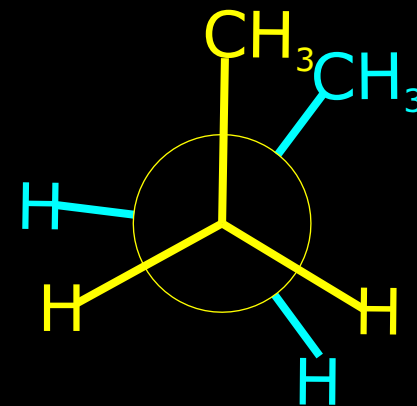
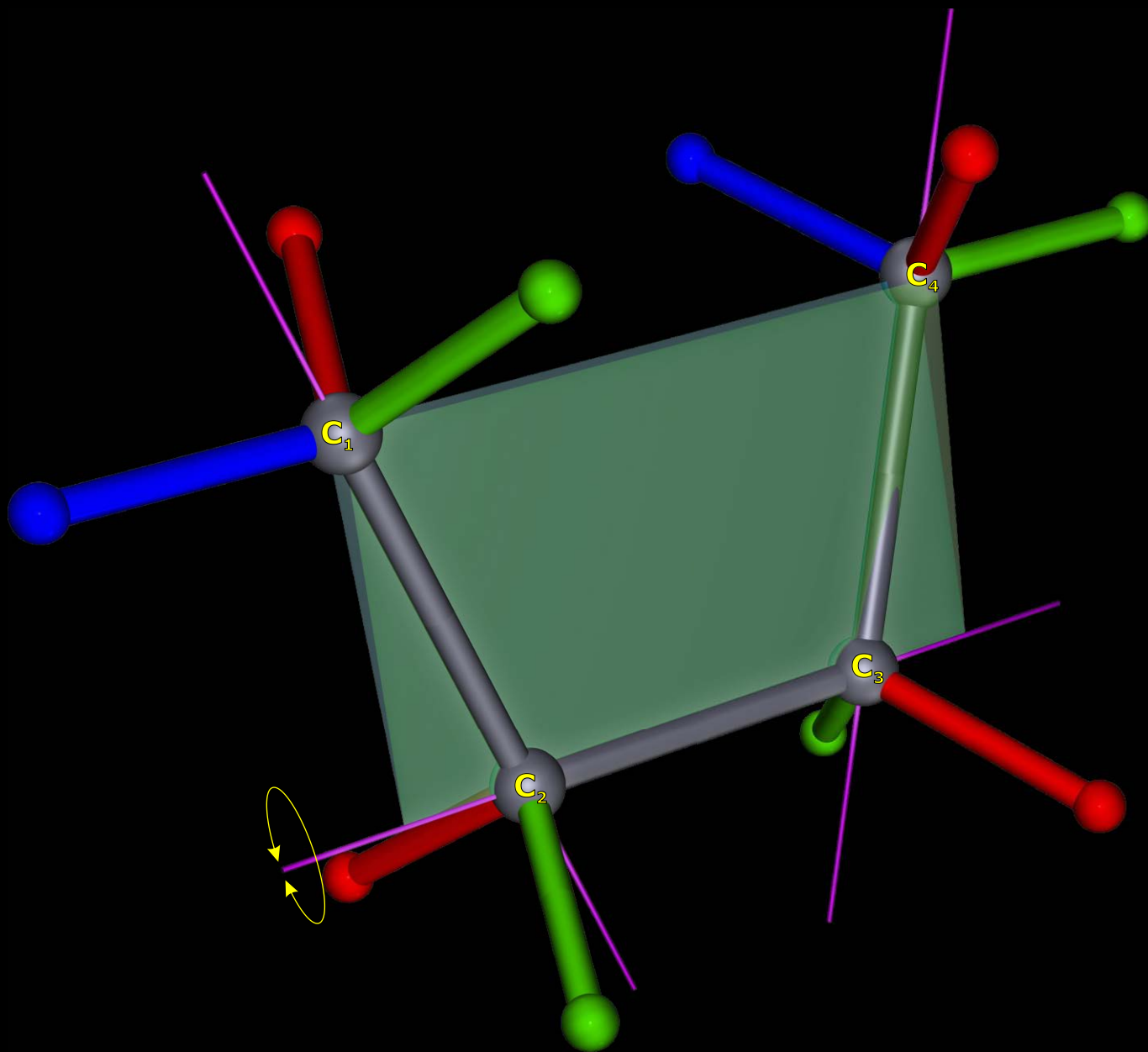


BUTAN: ANIMIRANI PRIKAZ ROTACIJE OKO OSE C₂-C₃.



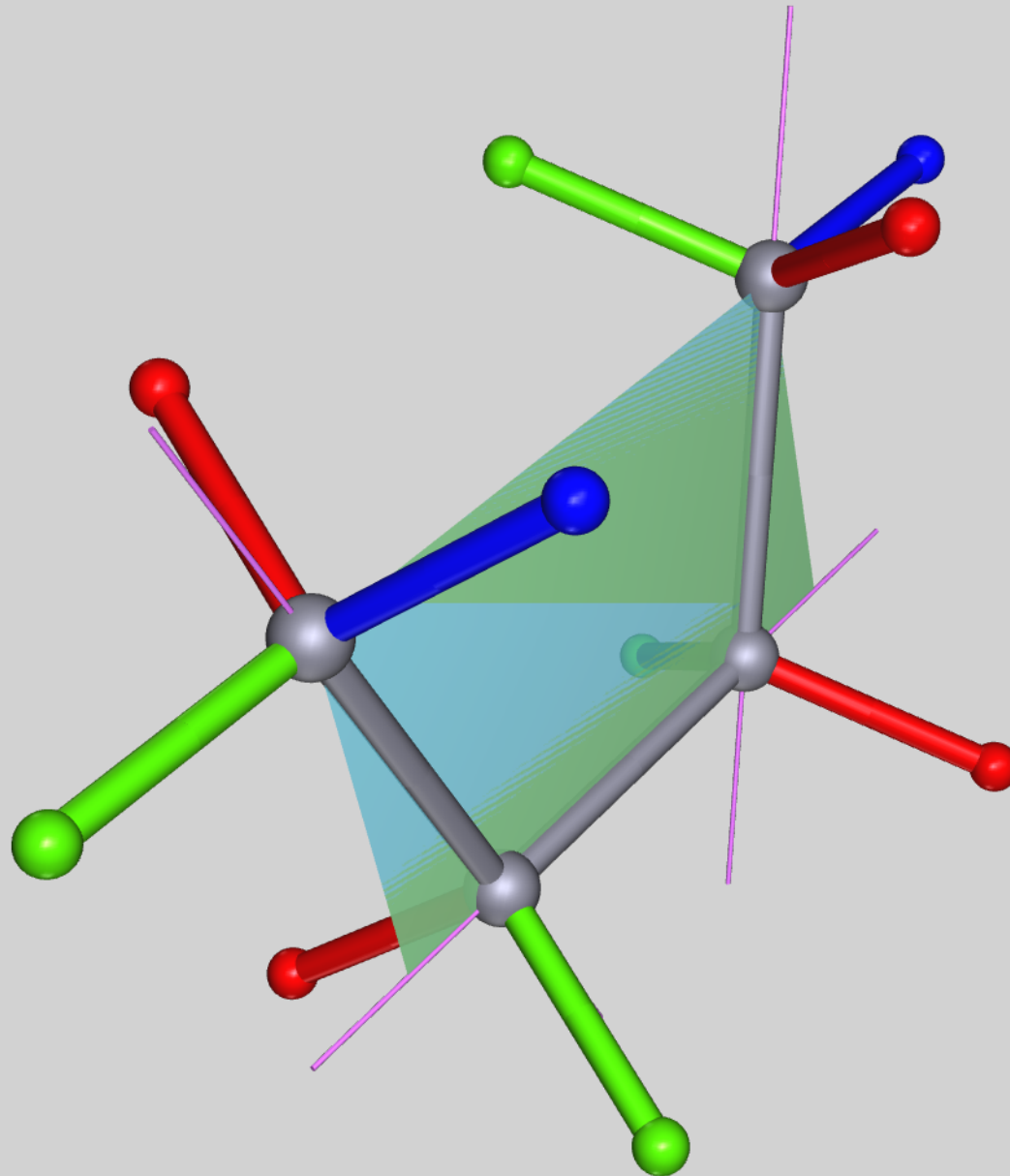
BUTAN: ČETIRI GRANIČNE KONFORMACIJE BUTANA:

1. APSOLUTNI MAKSIMUM (0/360°; 5,0 kcal/mol); EKLIPSNA KONFORMACIJA 1



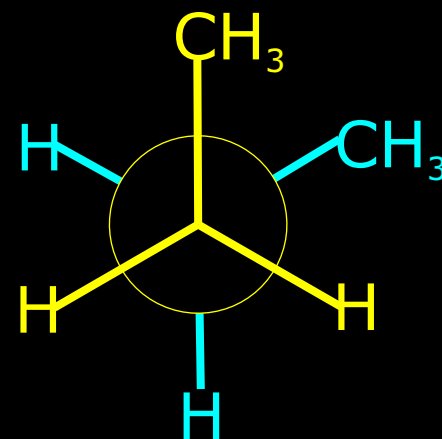
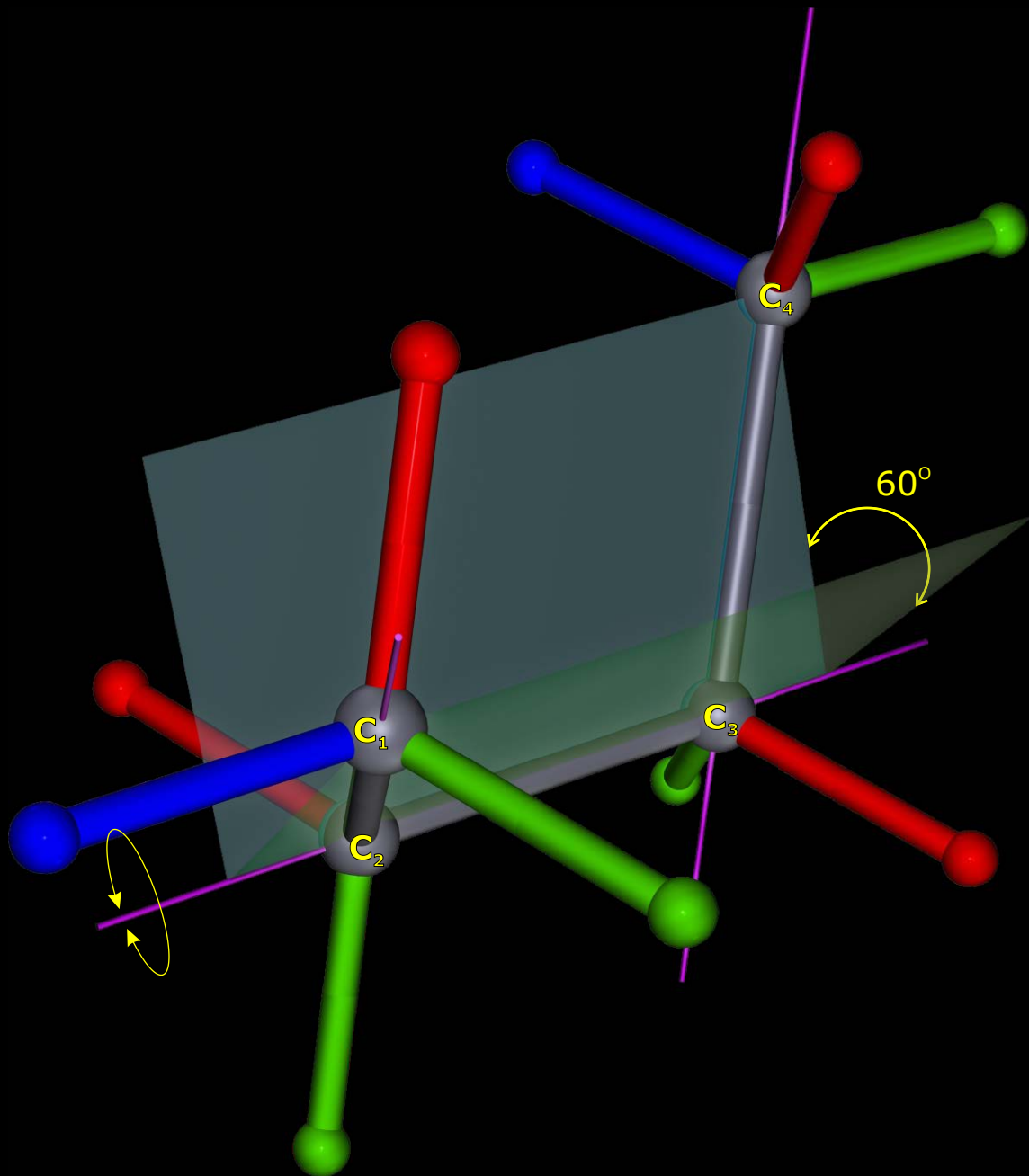
BUTAN: ČETIRI GRANIČNE KONFORMACIJE BUTANA:

1. **3D** PRIKAZ APSOLUTNOG MAKSIMUMA ($0/360^\circ$; 5,0 kcal/mol); EKLIPSNA KONFORMACIJA 1



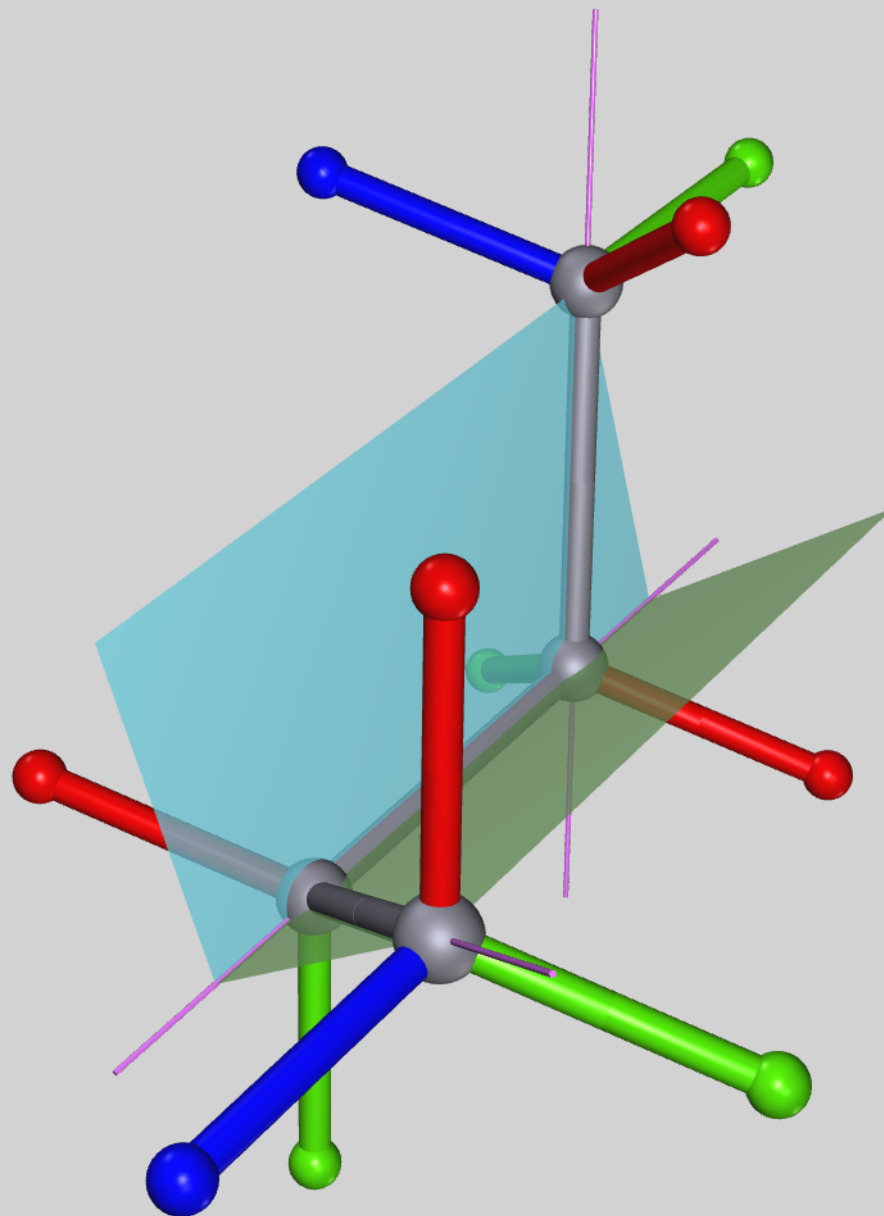
BUTAN: ČETIRI GRANIČNE KONFORMACIJE BUTANA:

2. RELATIVNI MINIMUM (60/300°; 0,9 kcal/mol); KOSA KONFORMACIJA 1



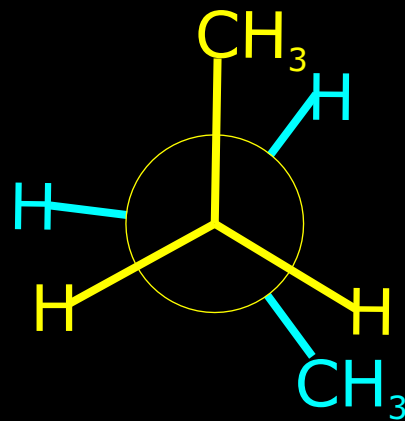
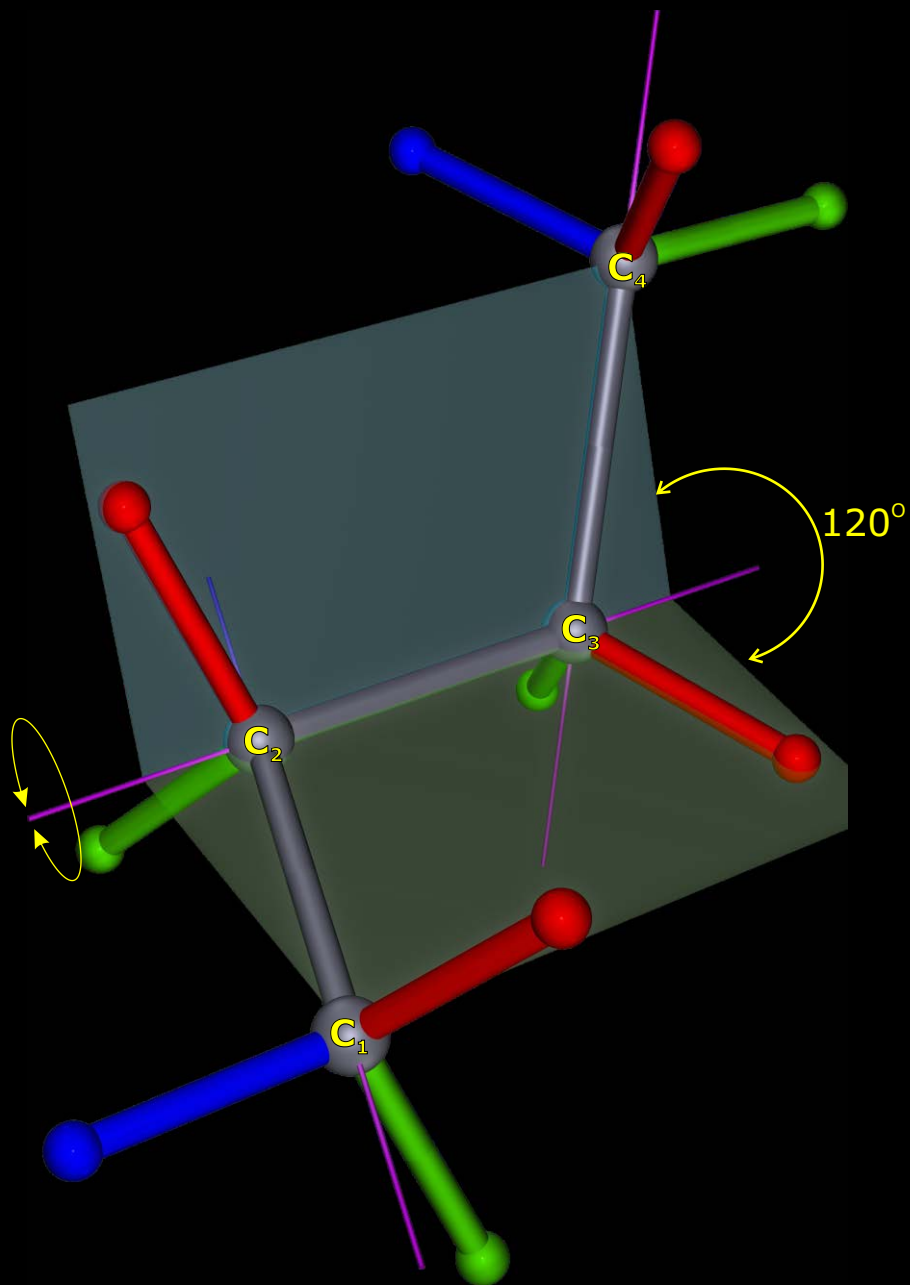
BUTAN: ČETIRI GRANIČNE KONFORMACIJE BUTANA:

2. **3D** PRIKAZ RELATIVNOG MINIMUMA ($60/300^\circ$; $0,9 \text{ kcal/mol}$); KOSA KONFORMACIJA 1



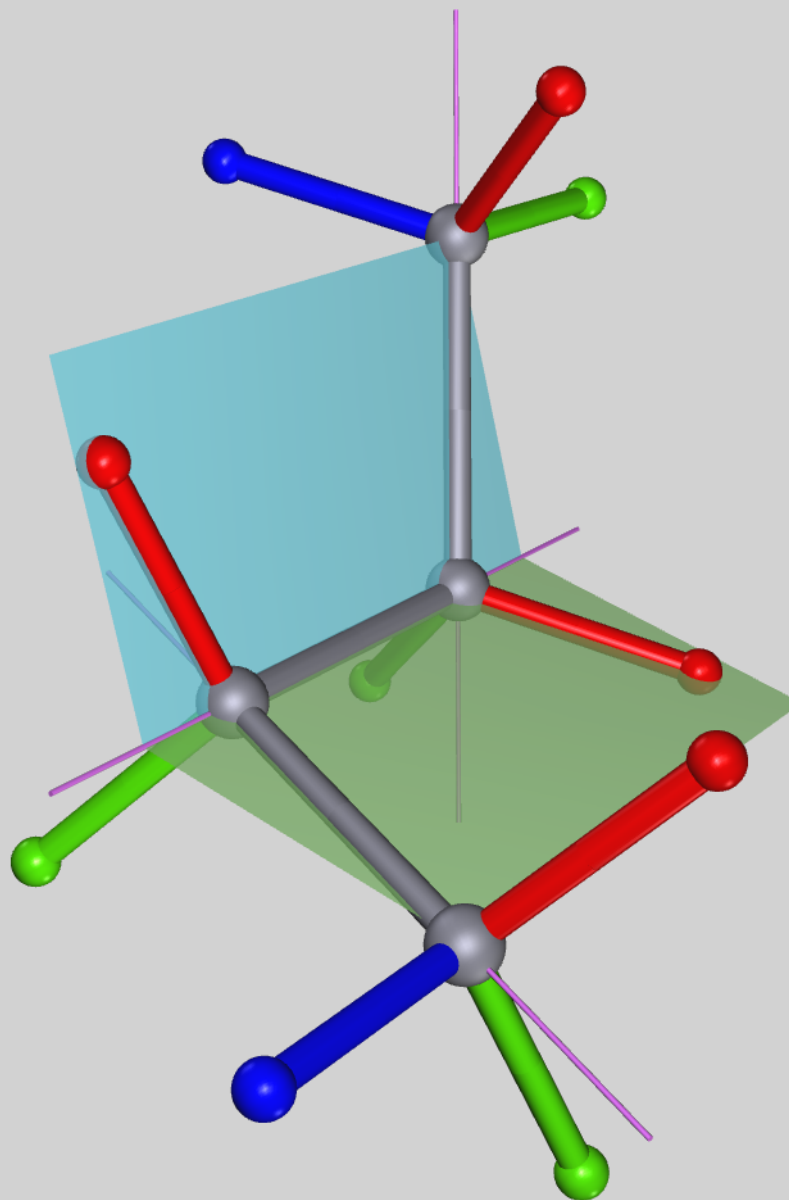
BUTAN: ČETIRI GRANIČNE KONFORMACIJE BUTANA:

3. RELATIVNI MAXIMUM (120/240°; 3,6 kcal/mol); EKLIPSNA KONFORMACIJA 2



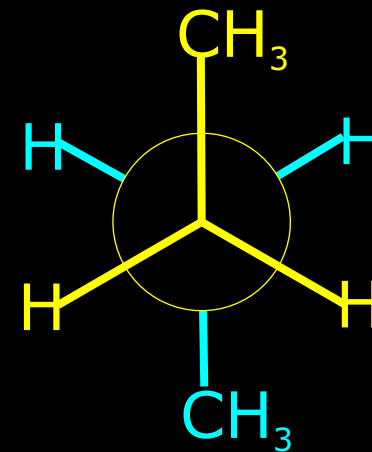
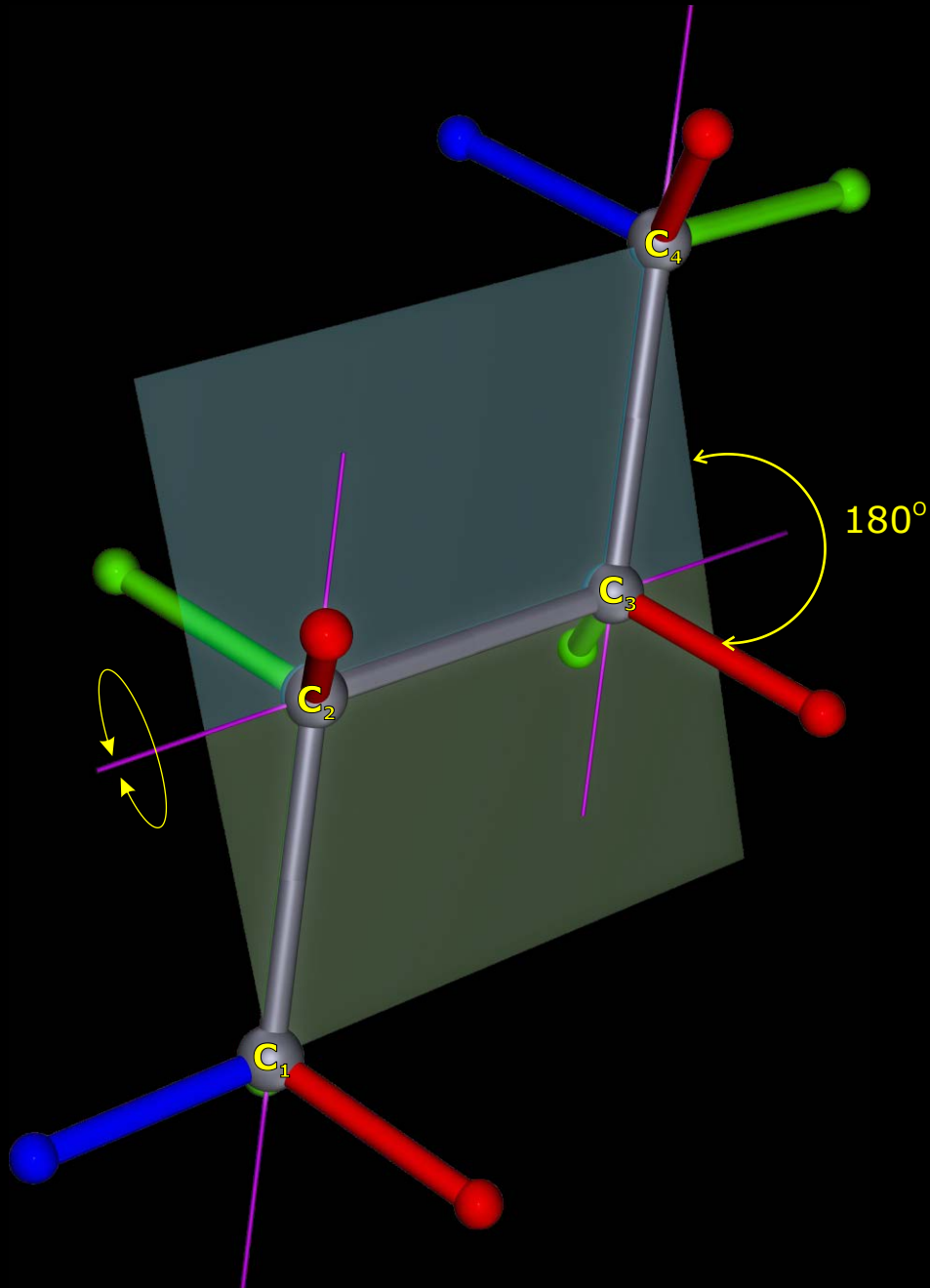
BUTAN: ČETIRI GRANIČNE KONFORMACIJE BUTANA:

3. **3D** PRIKAZ RELATIVNOG MAXIMUMA ($120/240^\circ$; 3,6 kcal/mol); EKLIPSNA KONFORMACIJA 2



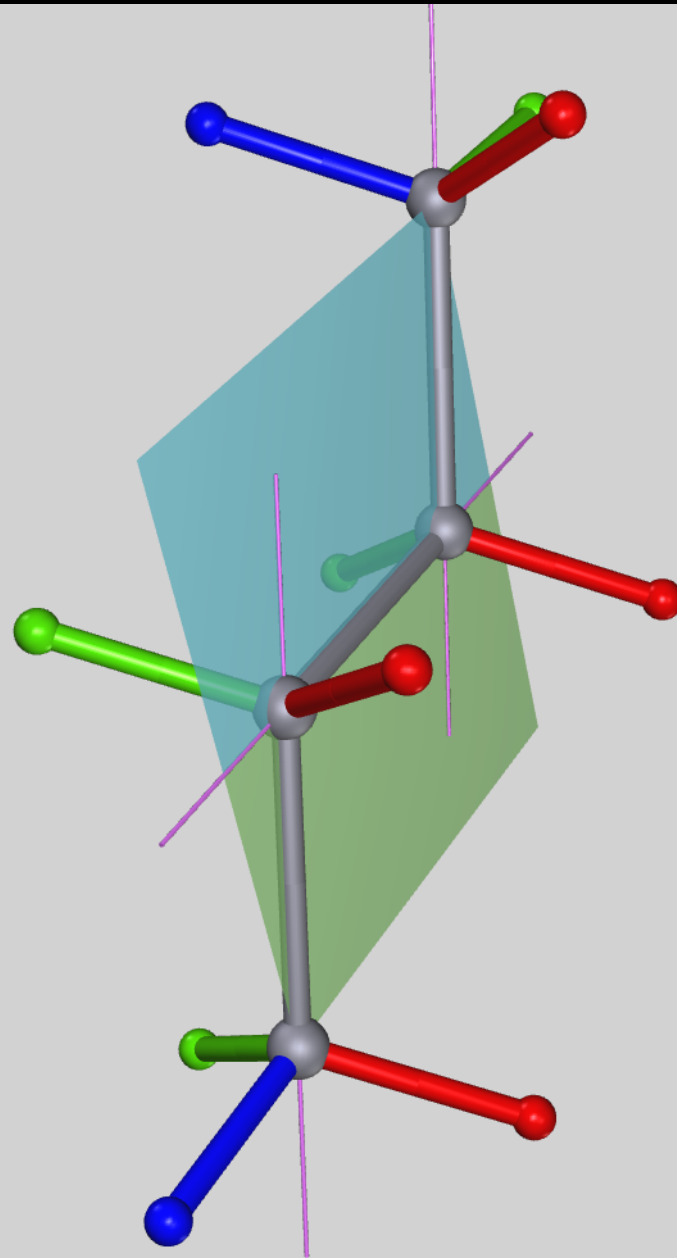
BUTAN: ČETIRI GRANIČNE KONFORMACIJE BUTANA:

4. APSOLUTNI MINIMUM (180° ; $0,0 \text{ kcal/mol}$); KOSA KONFORMACIJA 2



BUTAN: ČETIRI GRANIČNE KONFORMACIJE BUTANA:

4. **3D** PRIKAZ APSOLUTNOG MINIMUMA (180° ; 0,0 kcal/mol); KOSA KONFORMACIJA 2

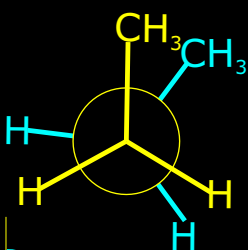


BUTAN: ENERGETSKI DIJAGRAM ROTACIJE OKO VEZE C₂-C₃ KAO FUNKCIJA DIEDARSKOG UGLA.

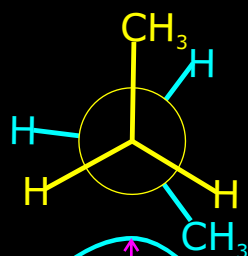
VREDNOSTI SE ODNOSI ISKLJUČIVO NA KONFORMACIONU ENERGIJU DATOG KONFORMERA, A NE NA UKUPNU ENERGIJU MOLEKULA. PROMENA ENERGIJE JE KONTINUALNA I PRATI SINUSOIDNU KRIVU KOJA SE RAZLIKUJE OD ETANA I PROPANA. NJUMENOVIM STRUKTURAMA PRIKAZANI SU SAMO GRANIČNI KONFORMERI: APSOLUTNI MAKSIMUM (0/360°; 5,0 kcal/mol), DVA RELATINA MAKSIMUMA (120/240°; 3,6 kcal/mol), DVA RELATINA MINIMUMA (60/300°; 0,9 kcal/mol) I APSOLUTNI MINIMUM (180°; 0,0 kcal/mol).

KRIVA KONFORMACIONE ENERGIJE (NIJE PRIKAZANA U SRAZMERI)

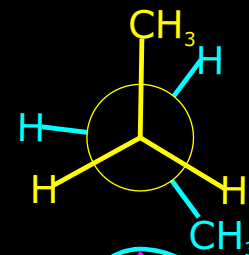
APSOLUTNI MAKSIMUM



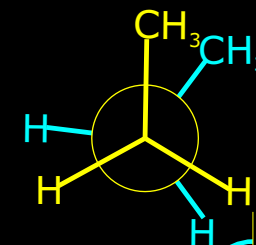
RELATIVNI MAKSIMUM



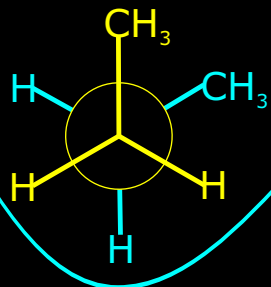
RELATIVNI MAKSIMUM



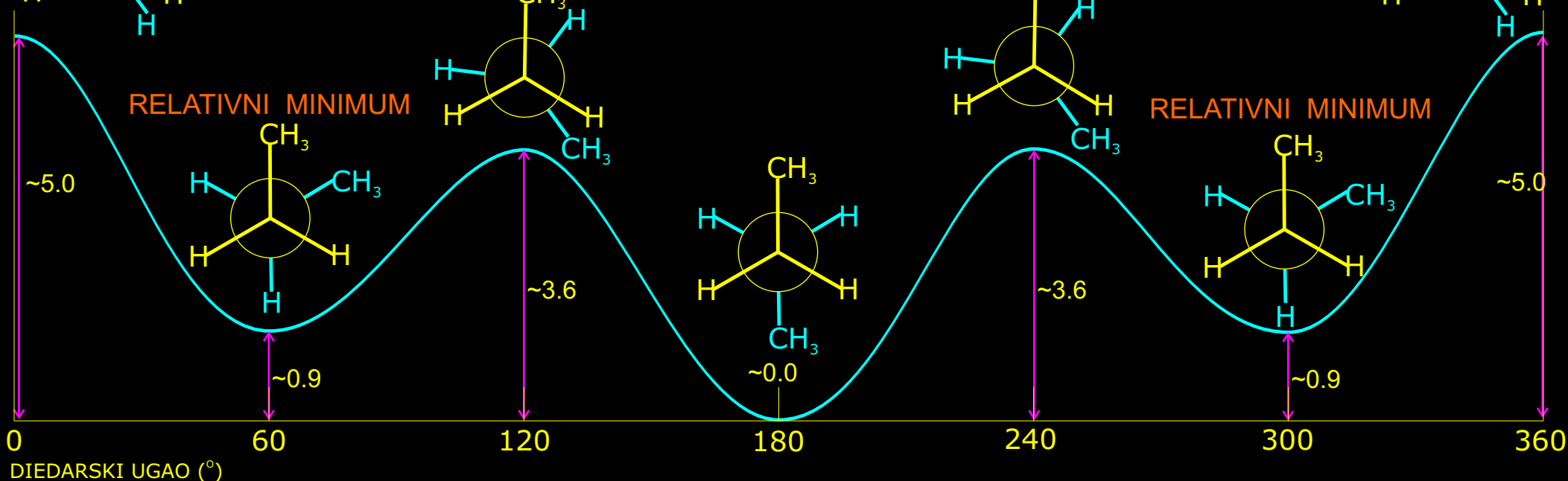
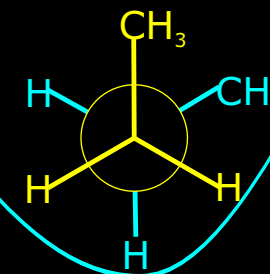
APSOLUTNI MAKSIMUM



RELATIVNI MINIMUM

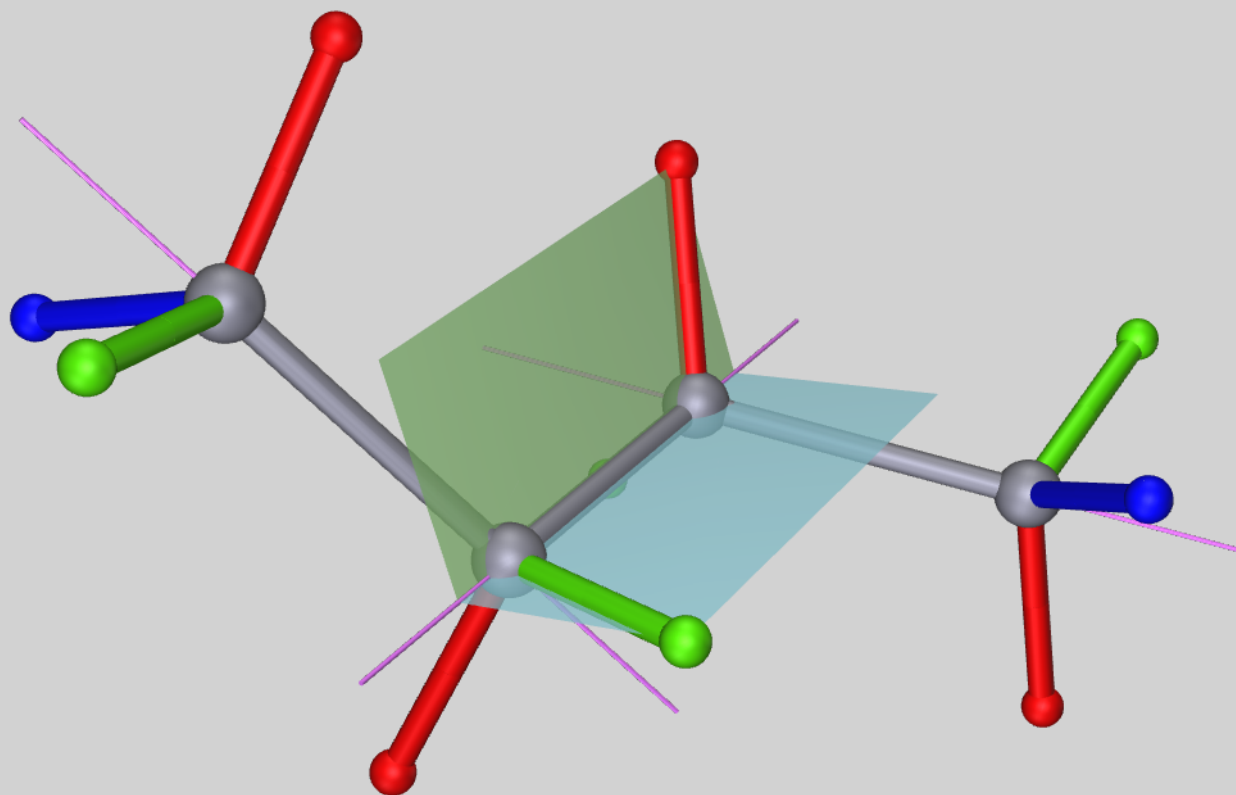


RELATIVNI MINIMUM

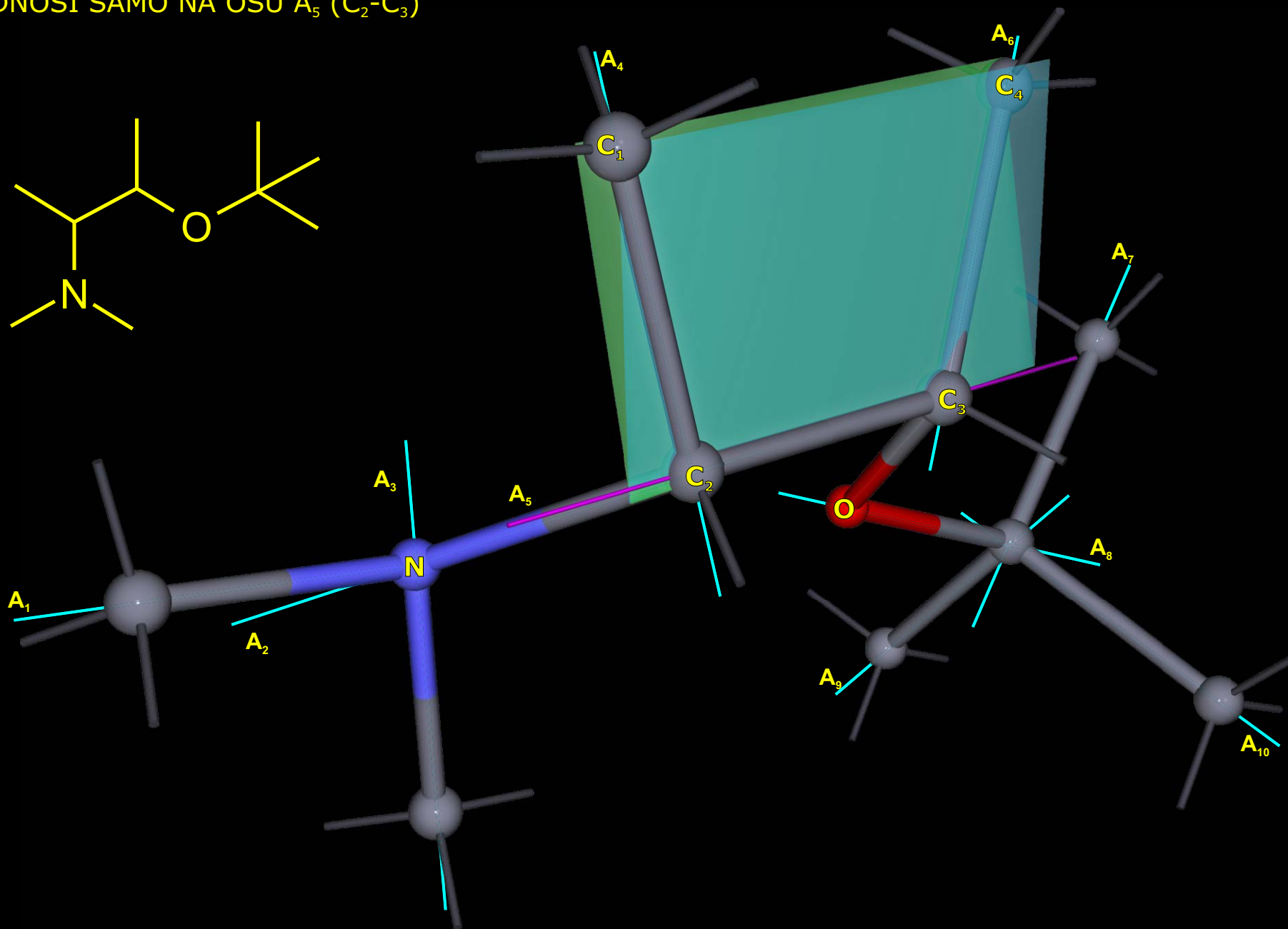
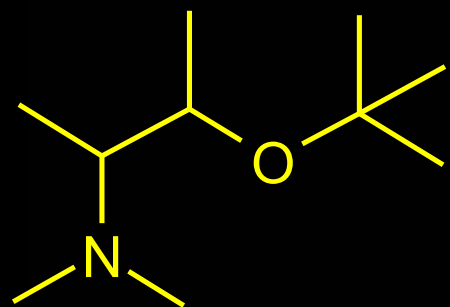


DIEDARSKI UGAO (°)

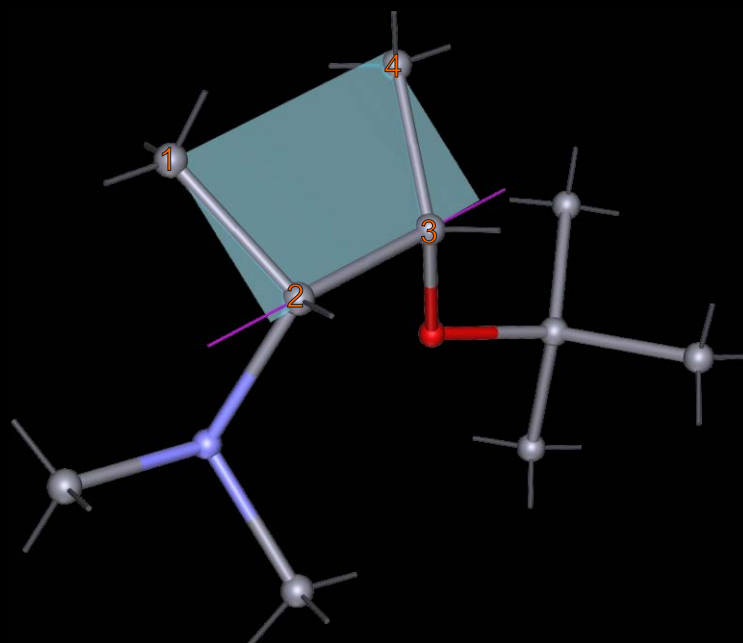
ANIMIRANI PRIKAZ SIMULTANE ROTACIJE MOLEKULA BUTANA OKO 3 OSE (3 C-C VEZE)



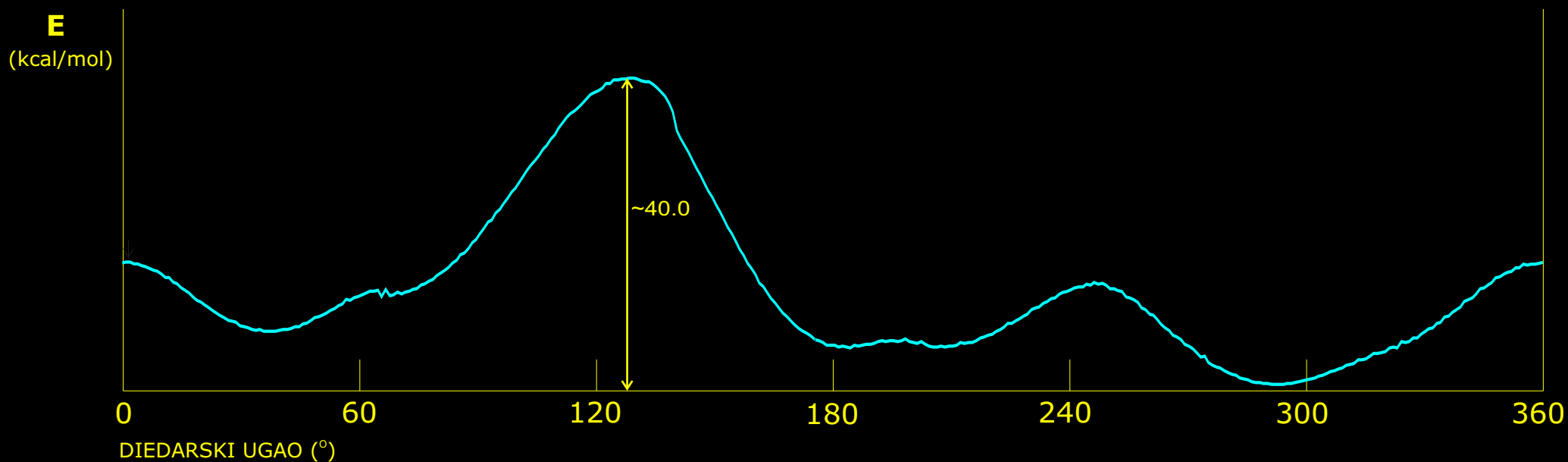
SUPSTITUISANI BUTAN: PRIKAZANO JE 10 OSA ROTACIJE (A_1 - A_{10}) OD KOJI SE ENERGETSKI DIJAGRAM ODNOSI SAMO NA OSU A_5 (C_2 - C_3)



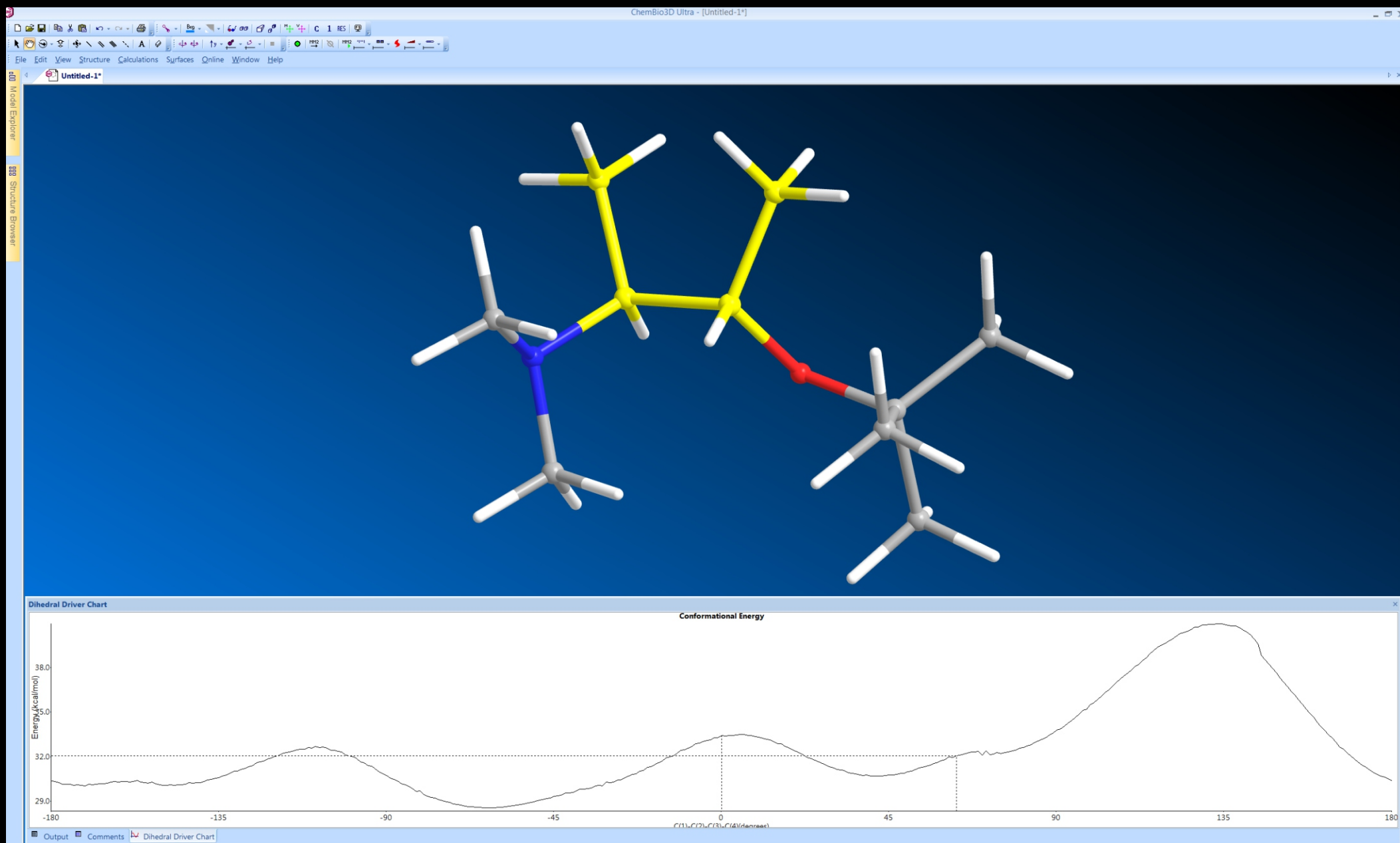
SUPSTITUISANI BUTAN: ENERGETSKI DIJAGRAM ODNOSI SE NA OSU C₂-C₃.



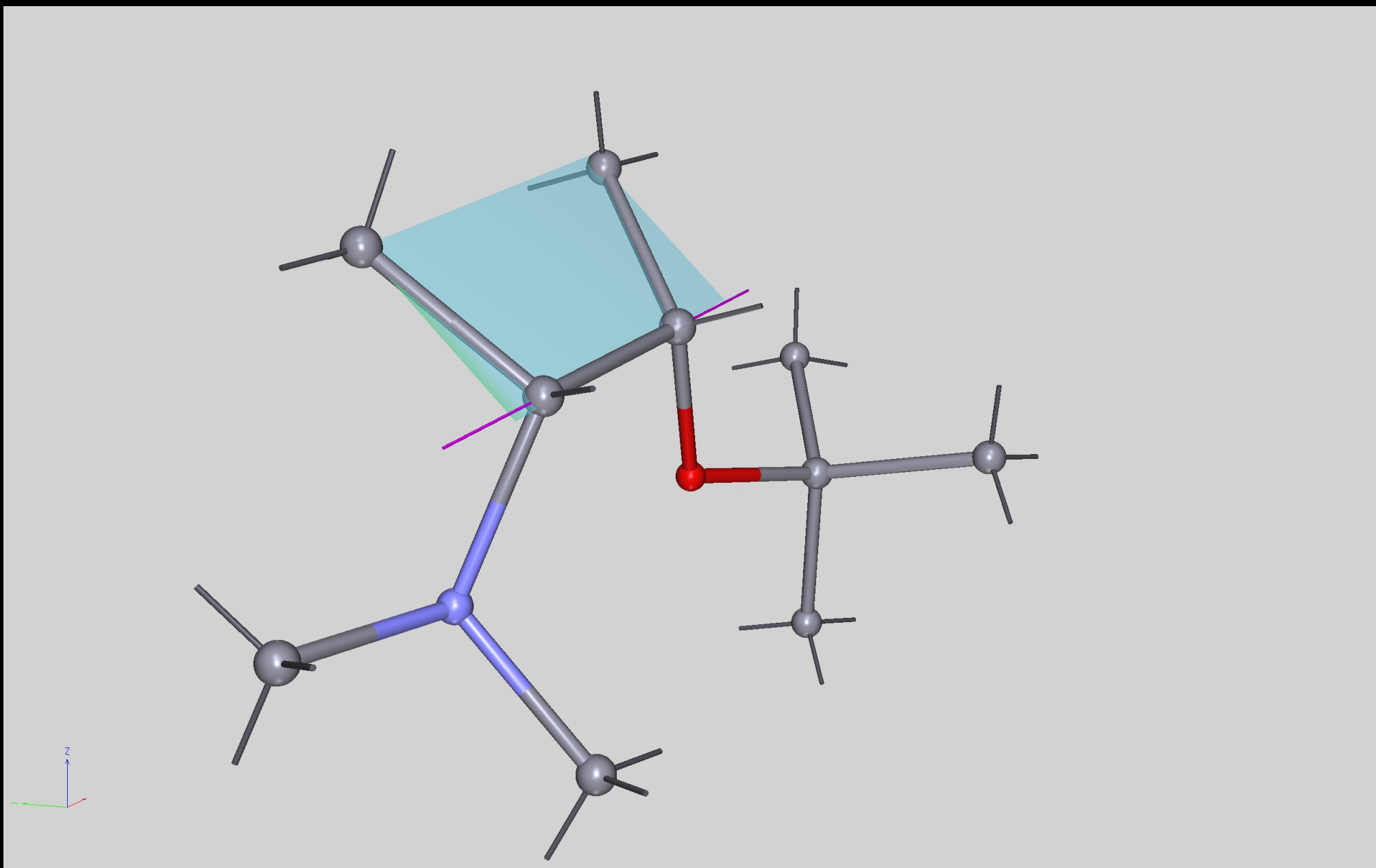
GRUBA APROKSIMACIJA ENERGETSKOG DIJAGRMA KONFORMACIONE ENERGIJE (NIJE PRIKAZANA U SRAZMERI)



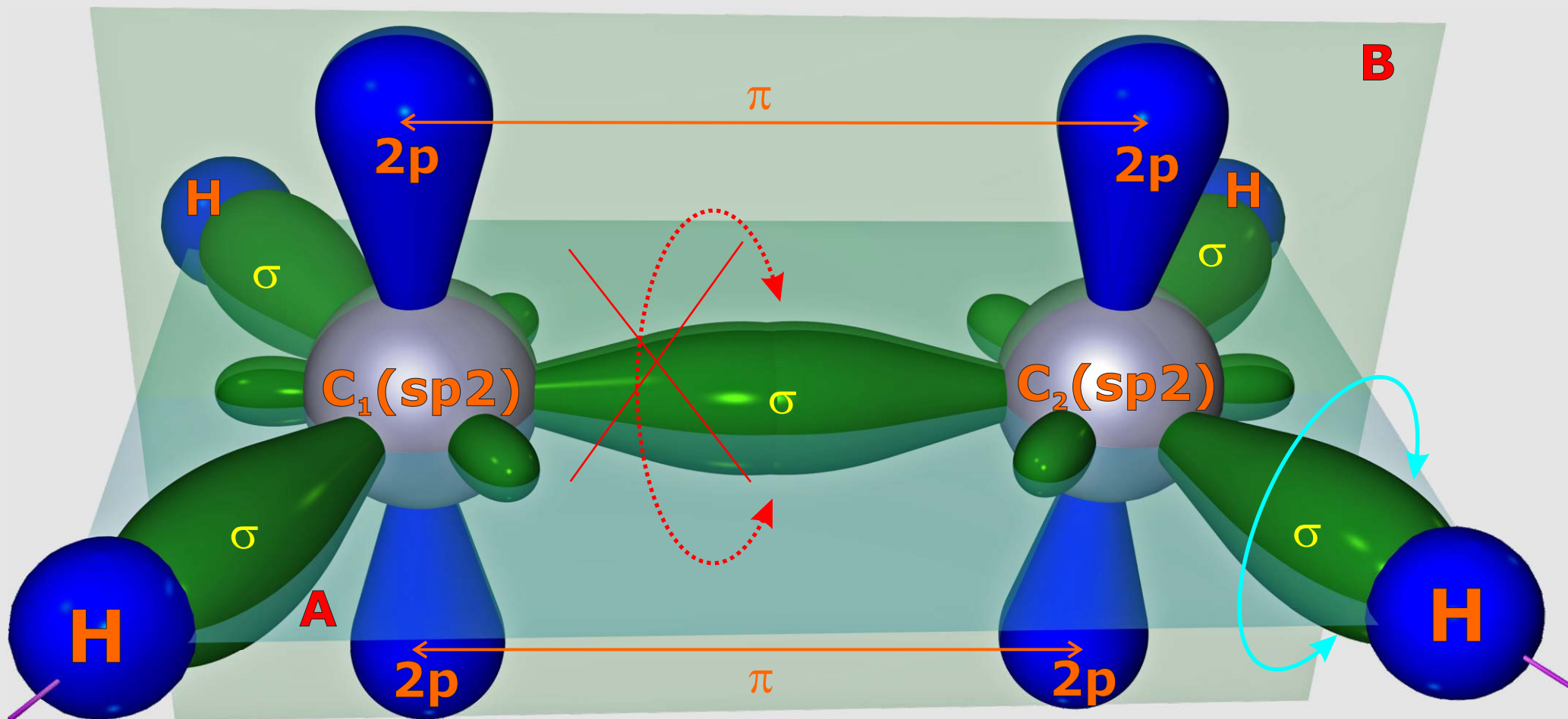
APROKSIMACIJA DIJAGRAMA KONFORMACIONE ENERGIJE SA PRETHODNE STRANE. DIJAGRAM JE PRORAČUNAT PRIMENOM PROGRAMA ChemBio3DUlta (modul Dihedral Driver). (Aproksimacija je vrlo niske preciznosti). SLIKA PREDSTAVLJA "PRINT SCREEN", A VEZE KOJE DEFINIŠU DIEDARSKI UGAO OBOJENE SU ŽUTO. (DIJAGRAM KONFORMACIONE ENERGIJE JE PRIKAZAN NA SKALI +/-180° A NE 0-360°).



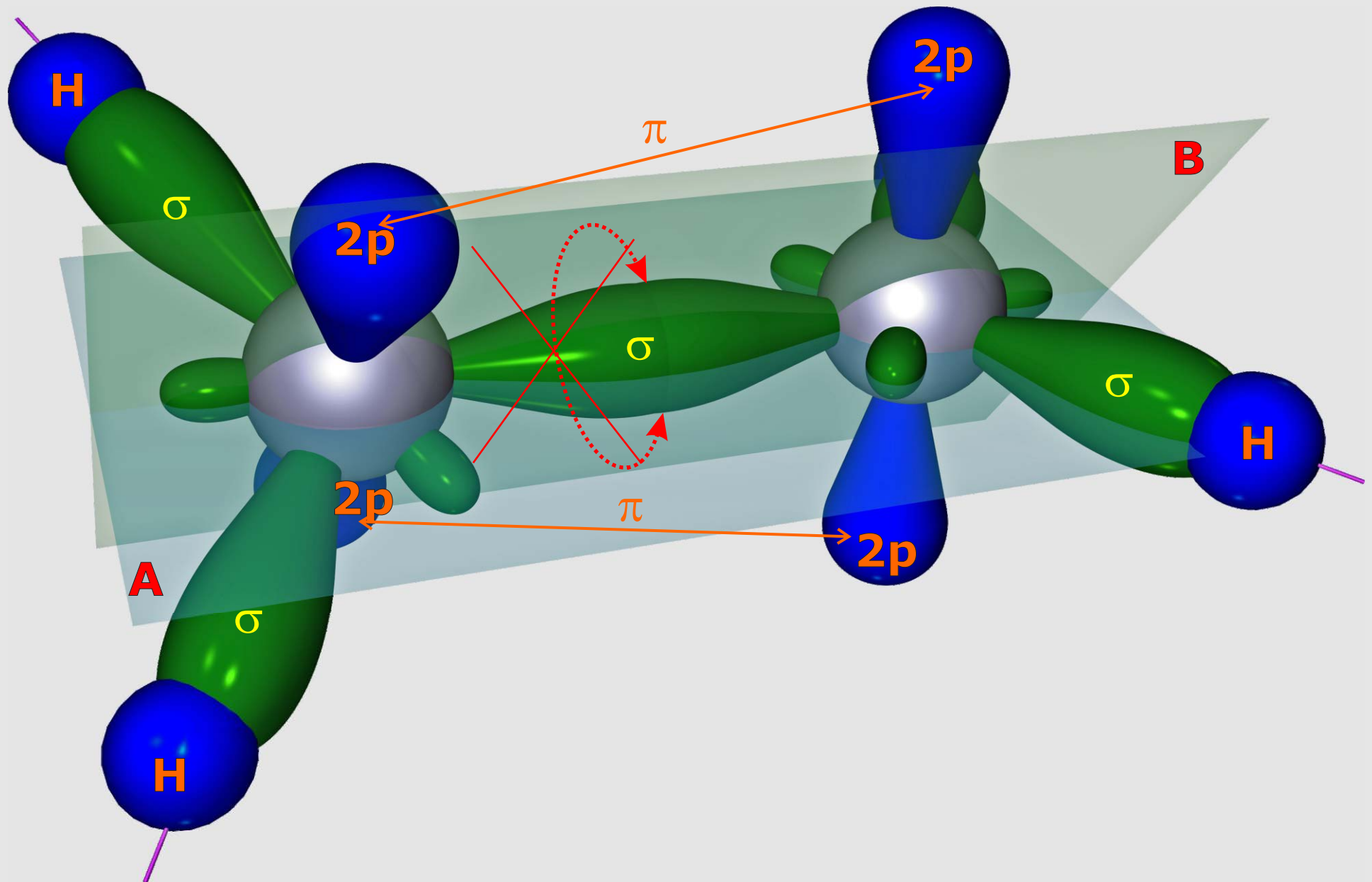
SUPSTITUISANI BUTAN: ANIMIRANI PRIKAZ ROTACIJE MOLEKULA OKO OSE C₂-C₃.



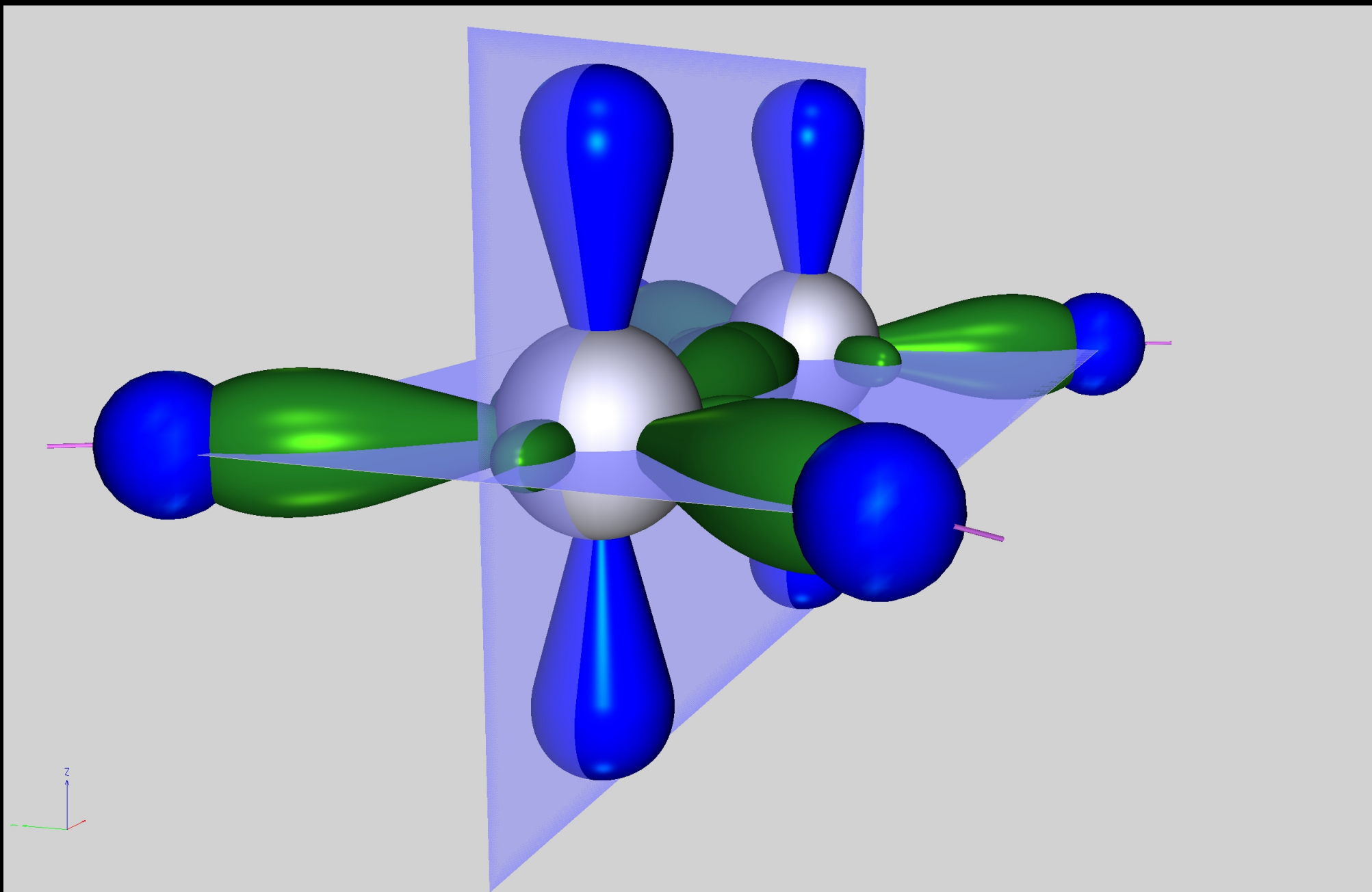
π VEZA POSTAJE BOČNIM PREKLAPANJEM NEHIBRIDIZOVANIH 2p ORBITALA. PREKLAPANJE ZAHTEVA DA DVE SUSEDNE 2p ORBITALE LEŽE U ISTOJ RAVNI (RAVAN B). UKOLIKO NE LEŽE, PREKLAPANJE NIJE MOGUĆE I VEZA SE RASKIDA. MEĐUTIM, KAKO TO ZAHTEVA MNOGO ENERGIJE, VEZA JE NORMALNO STABILNA, A ROTACIJA OKO π VEZE (TJ. C=C VEZE) NIJE MOGUĆA.



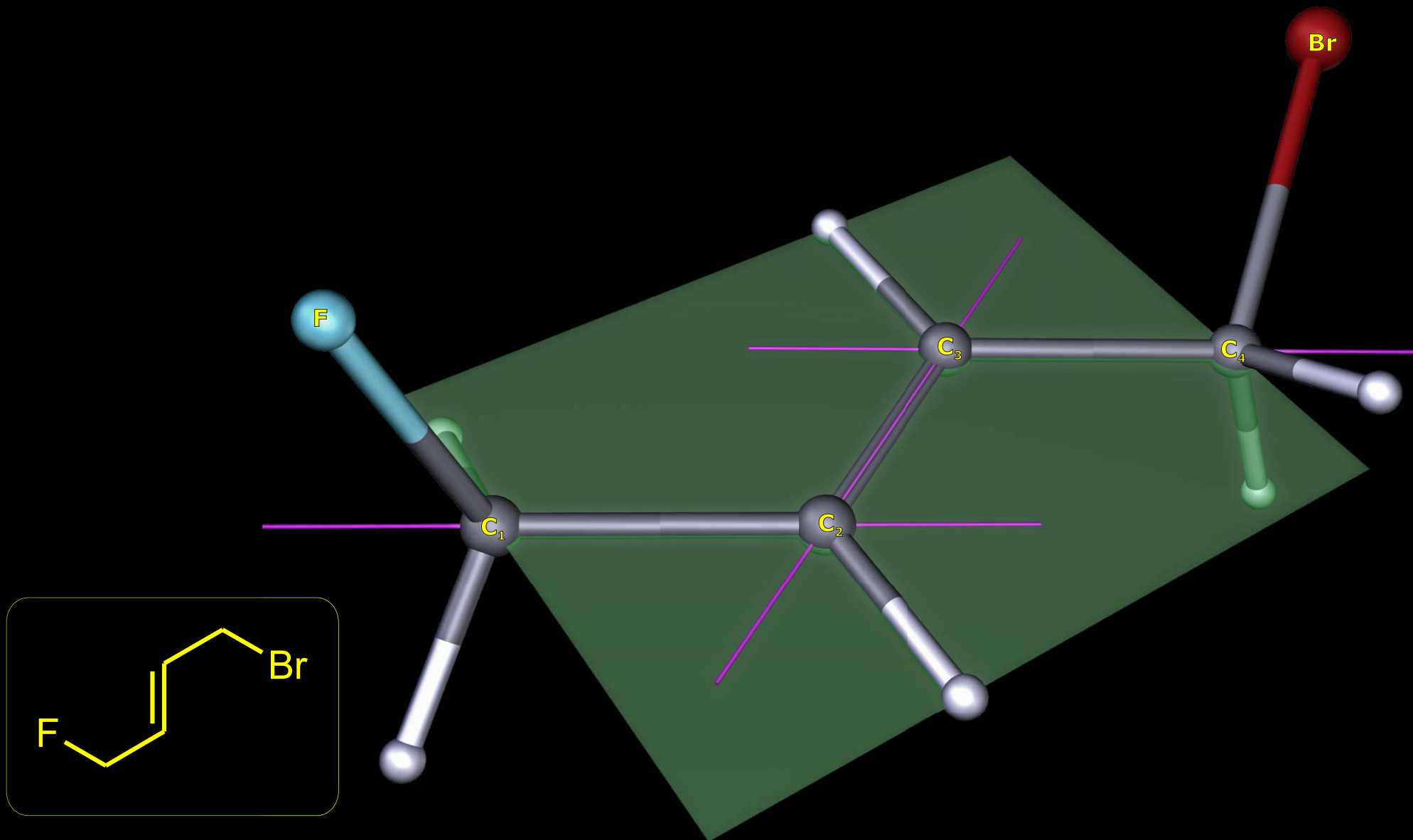
"NEMOGUĆA" ROTACIJA OKO C=C VEZE



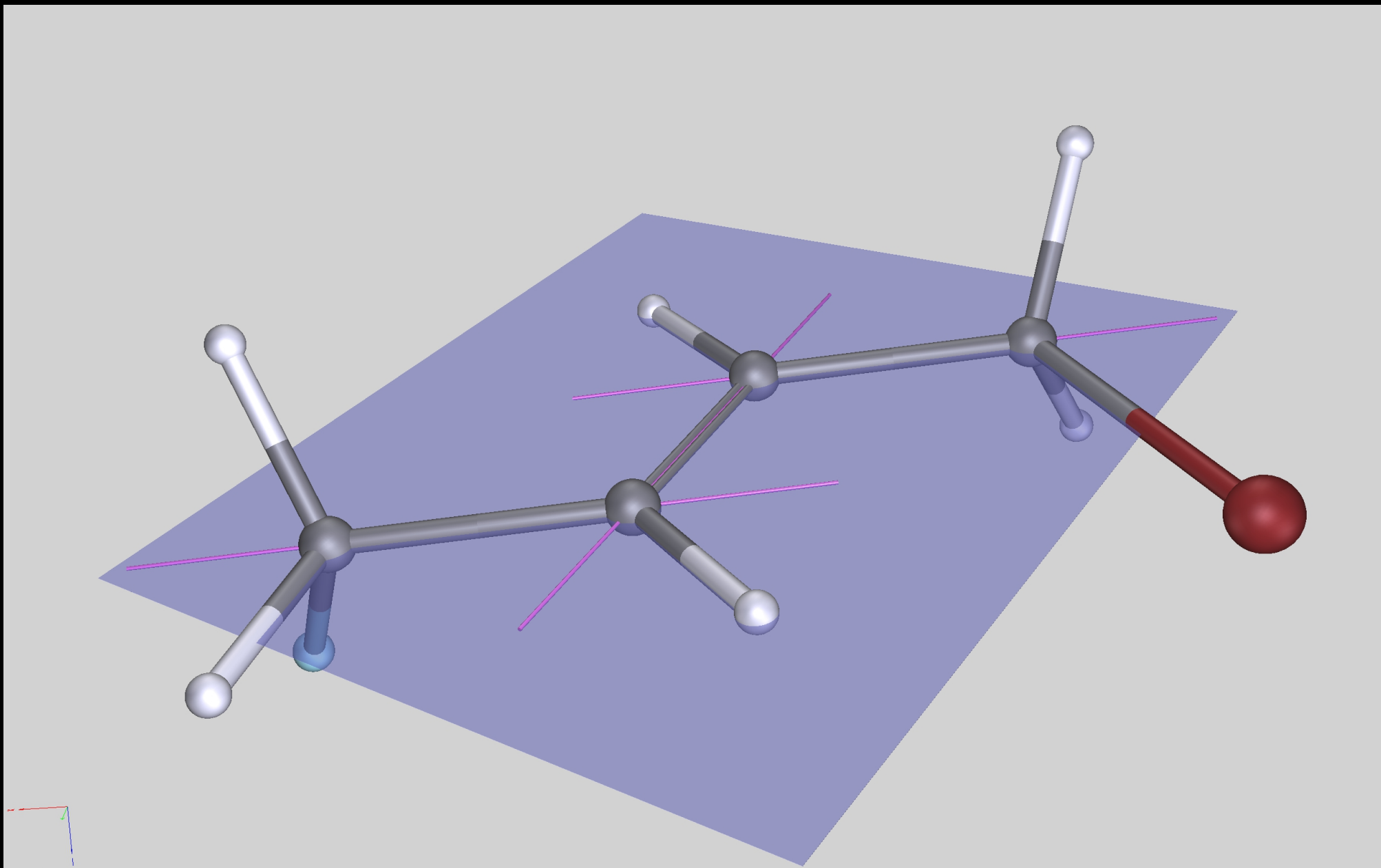
ANIMACIJA: "NEMOGUĆA" ROTACIJA OKO C=C VEZE



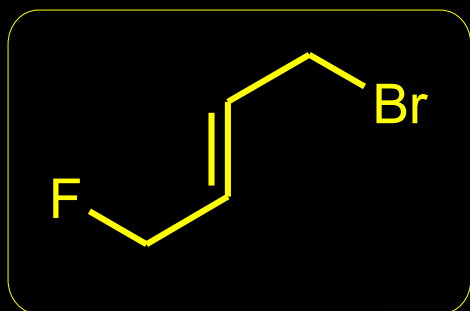
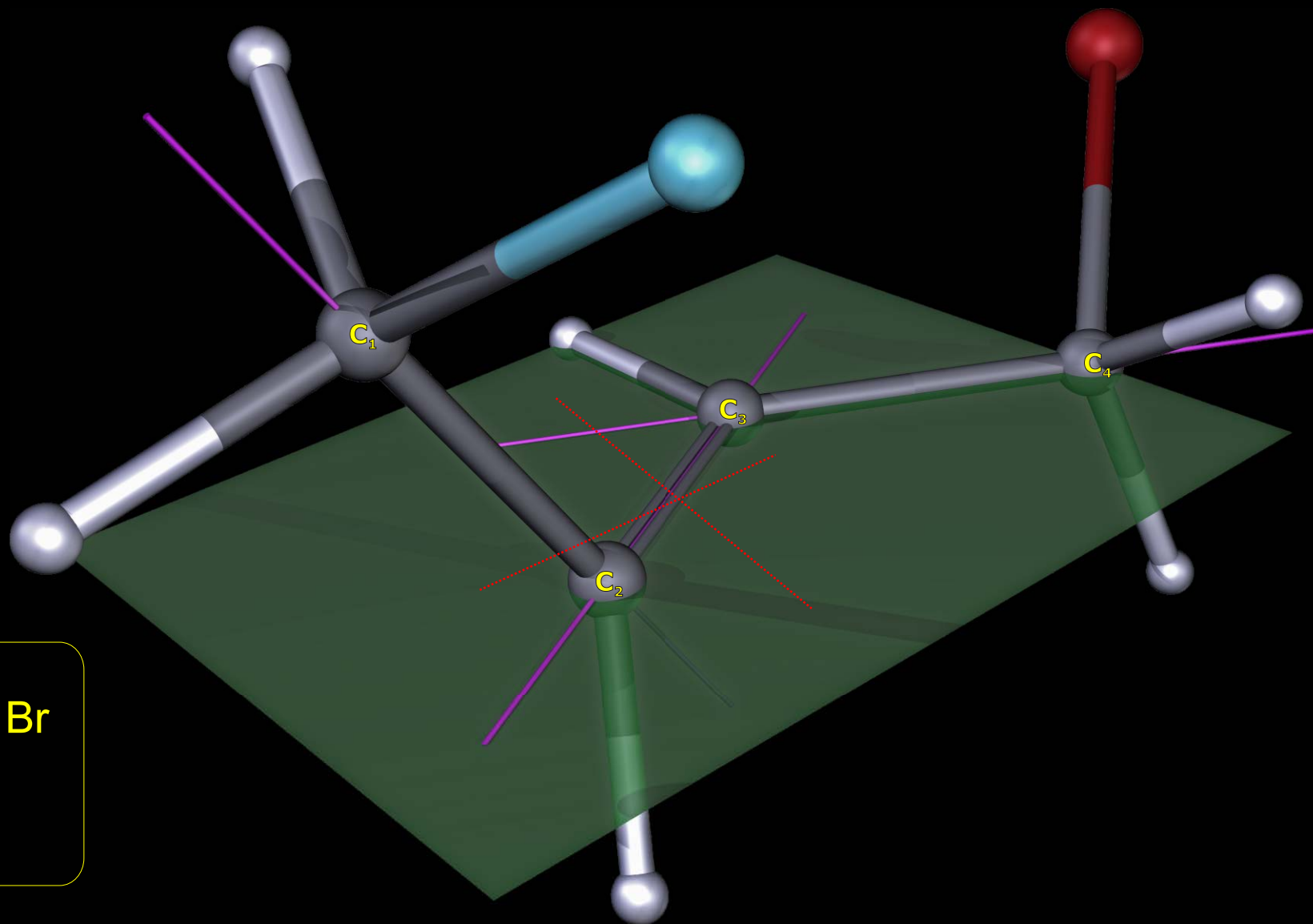
MOLEKUL SA C=C VEZOM. POSTOJE 3 OSE ROTACIJE, C_1-C_2 , C_2-C_3 I C_3-C_4 . ROTACIJA OKO C_2-C_3 JE MOGUĆA, ALI TAKO ŠTO ROTIRA CEO MOLEKUL **A NIKAKO SAMA VEZA** . (TAKVA ROTACIJA BI ZNAČILA RASKIDANJE π VEZE, TJ. HEMIJSKU REAKCIJU I DOVELA BI DO PROMENE KONFIGURACIJE E U Z ILI OBRNUTO).



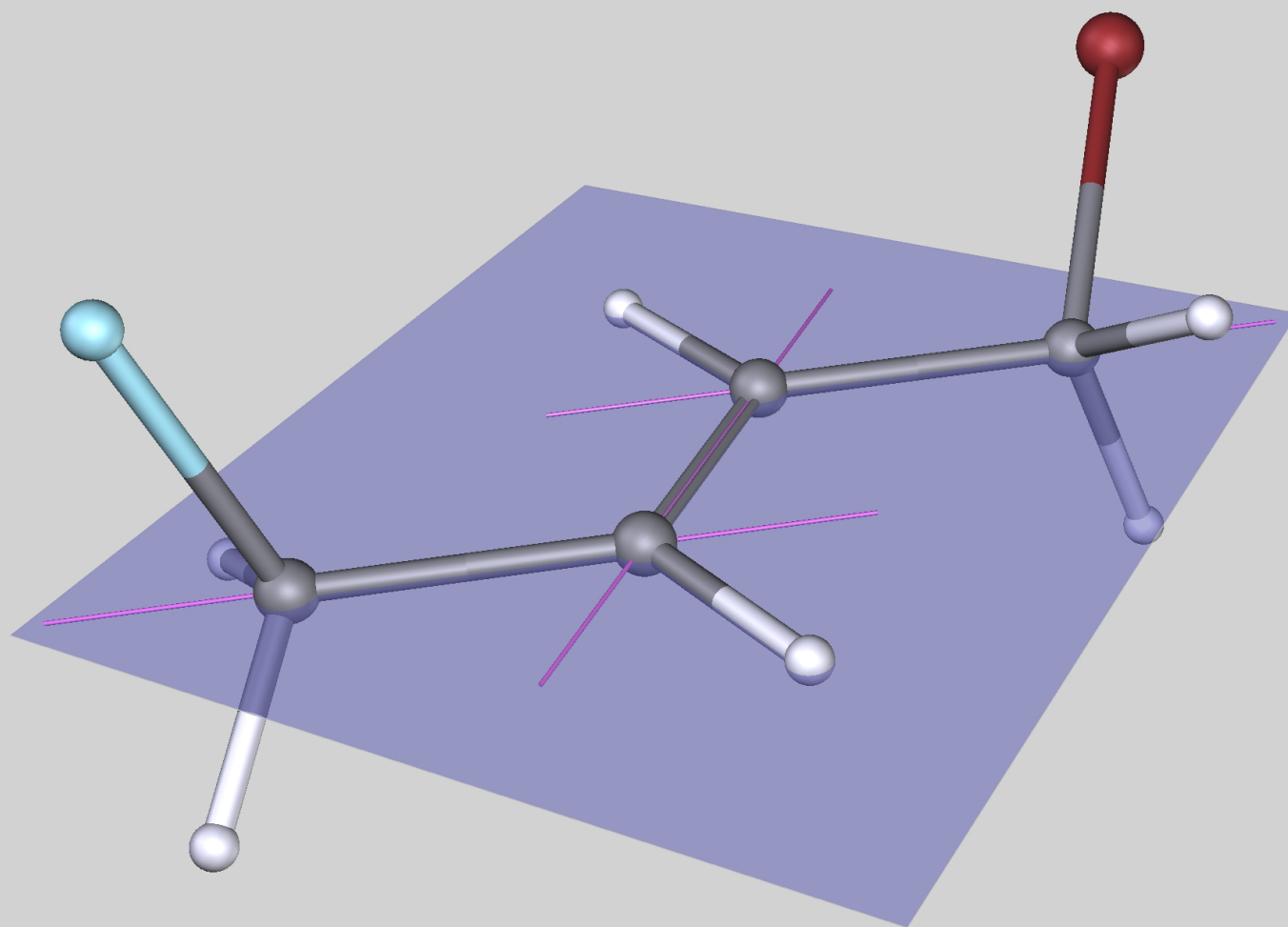
MOLEKUL SA C=C VEZOM. ANIMIRANI PRIKAZ ROTACIJE OKO 3 OSE (C_1-C_2 , C_2-C_3 I C_3-C_4). TOKOM ROTACIJE, **KONFIGURACIJA C=C VEZE SE NIKAKO NE MENJA!**



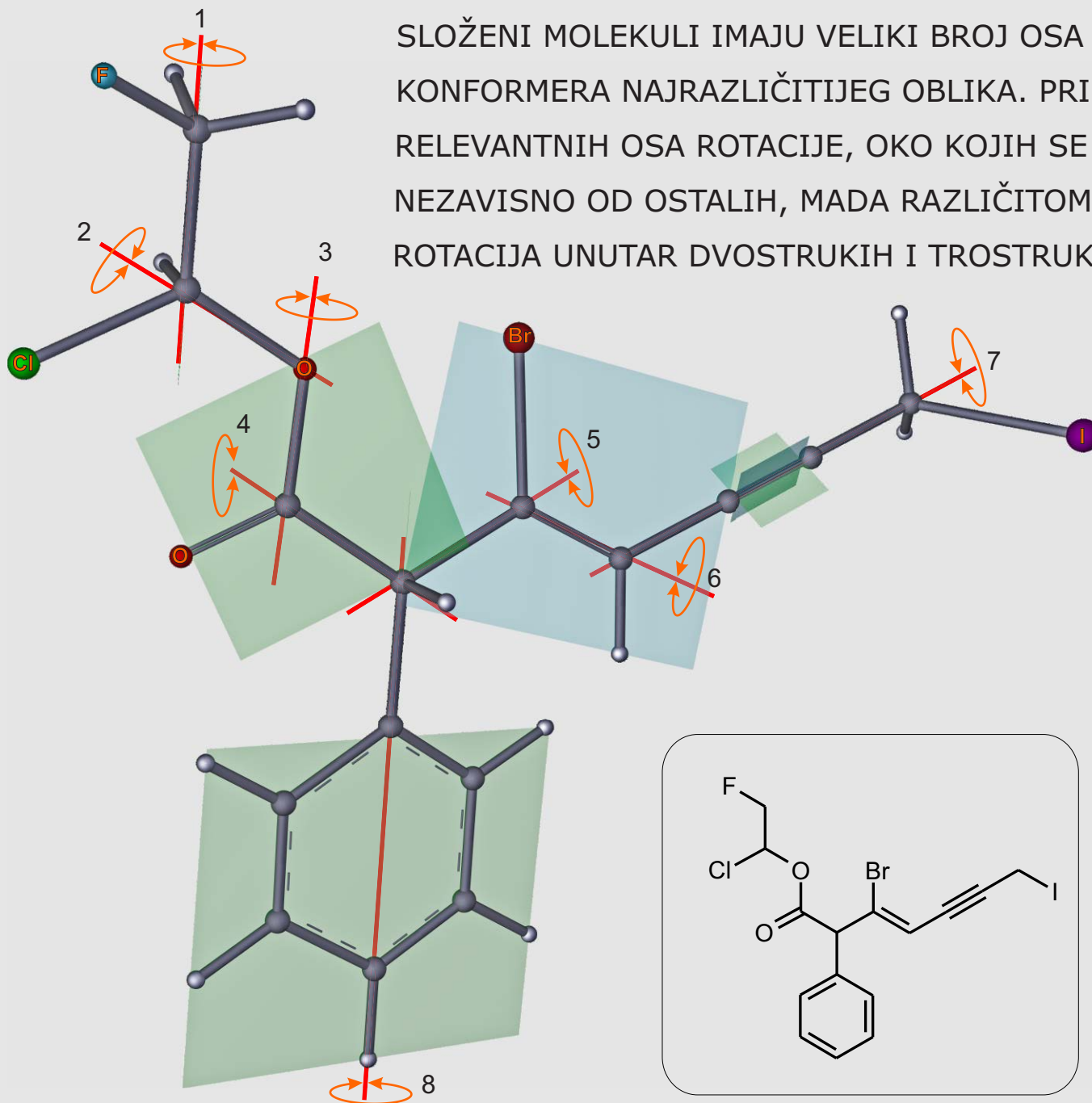
MOLEKUL SA C=C VEZOM. **NEMOGUĆA ROTACIJA OKO C₂=C₃ VEZE!** (TAKVA ROTACIJA BI ZNAČILA RASKIDANJE π VEZE, TJ. HEMIJSKU REAKCIJU I DOVELA BI DO PROMENE KONFIGURACIJE **E** U **Z** ILI OBRNUTO).



MOLEKUL SA C=C VEZOM. ANIMIRANI PRIKAZ **NEMOGUĆE ROTACIJE OKO C₂=C₃ VEZE.**

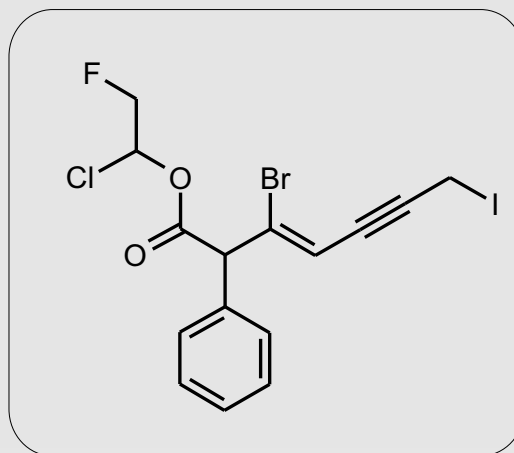


ROTACIJE SLOŽENIH MOLEKULA.



SLOŽENI MOLEKULI IMAJU VELIKI BROJ OSA ROTACIJE I NEOGRANIČENI BROJ KONFORMERA NAJRAZLIČITIJE OBLIKA. PRIKAZANA STRUKTURA IMA 8 RELEVANTNIH OSA ROTACIJE, OKO KOJIH SE ROTACIJA VRŠI RELATIVNO NEZAVISNO OD OSTALIH, MADA RAZLIČITOM BRZINOM. OBRATITI PAŽNJU DA SE ROTACIJA UNUTAR DVOSTRUKIH I TROSTRUKIH VEZA (C=C, C≡C, C=O, C=N, C≡N I DR. UOPŠTE NE VRŠI, JER JE SPREČENA PRISUSTVOM

JEDNE ILI DVE π VEZE, KOJE DELUJU KAO "PREČAGE". MEĐUTIM, ROTACIJE OKO DVOSTRUKE VEZE KAO CELINE JE MOGUĆA, NARAVNO BEZ PROMENE KONFIGURACIJE.



ROTACIJE SLOŽENIH MOLEKULA. ANIMIRANI PRIKAZ ROTACIJE POJEDINIH FRAGMENTATA MOLEKULA PRIKAZANOG NA PRETHODNOJ STRANI, OKO ODGOVARAJUĆIH OSA ROTACIJE (UKUPNO 6). (CENTAR ROTACIJE JE POSTAVLJEN U C=C VEZU KOJA ZATO IZGLEDA STATIČNO).

