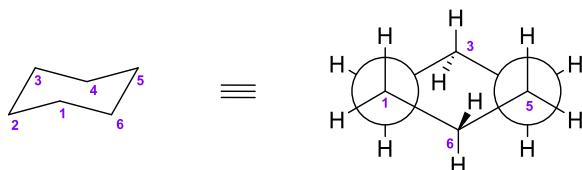


11 Konformationen ringförmiger Moleküle

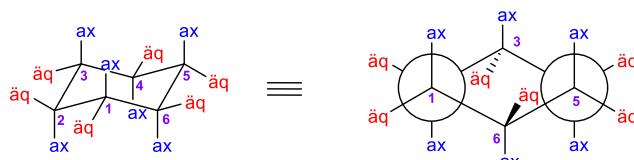
1. Doppelte Newman-Projektion:

(a) Zeichnen Sie die doppelte Newman-Projektion für Cyclohexan.

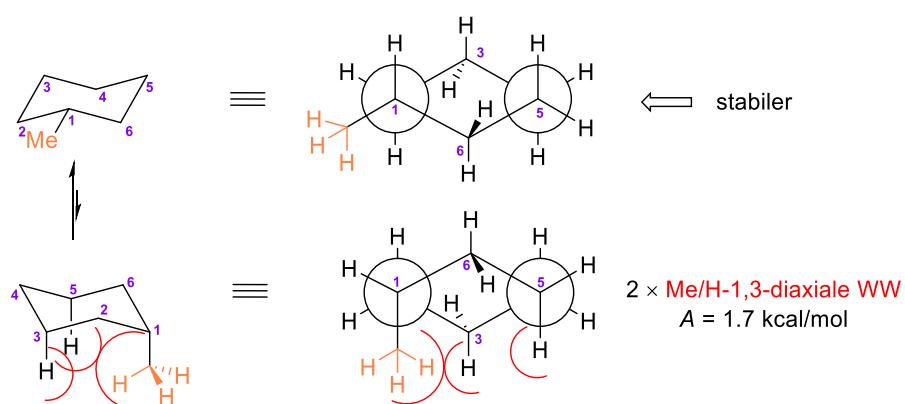
Tipp: Die Projektionen sind entlang C(1)–C(2) und C(5)–C(4).



(b) Zeichnen Sie alle axialen und äquatorialen Positionen ein.



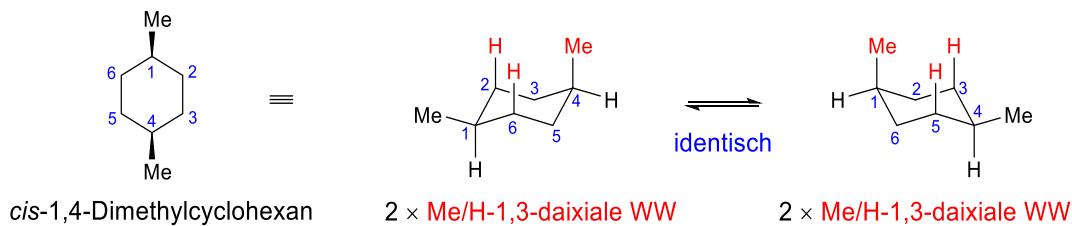
(c) Zeichnen Sie die doppelte Newman-Projektion für Methylcyclohexan. Wird die Methylgruppe in axialer oder äquatorialer Position stehen? Denken Sie darüber nach, welche Position energetisch günstiger ist.



2. Sessel- und Wannenkonformationen:

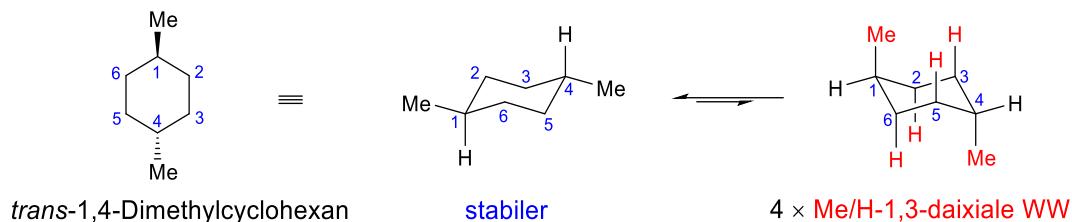
(a) Zeichnen Sie die beiden Sesselkonformationen von *cis*-1,4-Dimethylcyclohexan und bestimmen Sie, welches Konformer stabiler ist.

Beide Konformere sind gleich stabil (identisch):



(b) Zeichnen Sie die beiden Sesselkonformationen von *trans*-1,4-Dimethylcyclohexan und bestimmen Sie, welches Konformer stabiler ist.

Das Konformer mit den äquatorialen Methylgruppen ist stabiler:

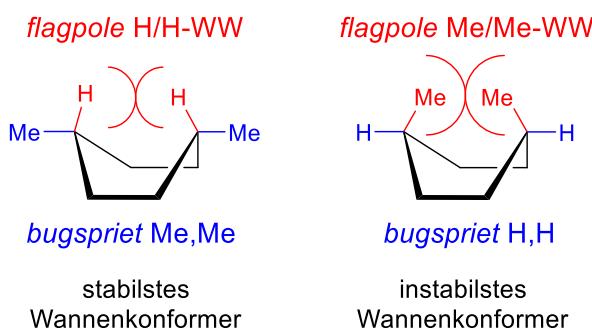


(c) Welches Isomer (*cis*- oder *trans*-) liefert die höhere Verbrennungswärme?

Von allen Sesselformen ist das diaxiale Konformer von *trans*-1,4-Dimethylcyclohexan am instabilsten, weil es 4 Me/H-1,3-diaxiale Wechselwirkungen besitzt. *trans*-1,4-Dimethylcyclohexan wird deshalb hauptsächlich in der stabilen diäquatorialen Form vorliegen, die keine solche Wechselwirkungen besitzt. Dementsprechend, liefert das *cis*-Isomer mit 2 Me/H-1,3-diaxiale Wechselwirkungen die höchste Verbrennungswärme.

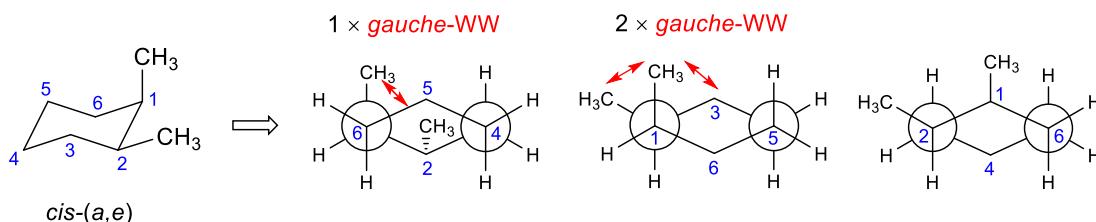
(d) Zeichnen Sie vom *cis*-Isomer das stabilste und das instabilste Wannenkonformer.

Von den Wannenkonformeren ist dasjenige am stabilsten oder am wenigstesten stabil, bei dem die Methylgruppen die «*bugspriet*»- beziehungsweise «*flagpole*»-Positionen besetzen.

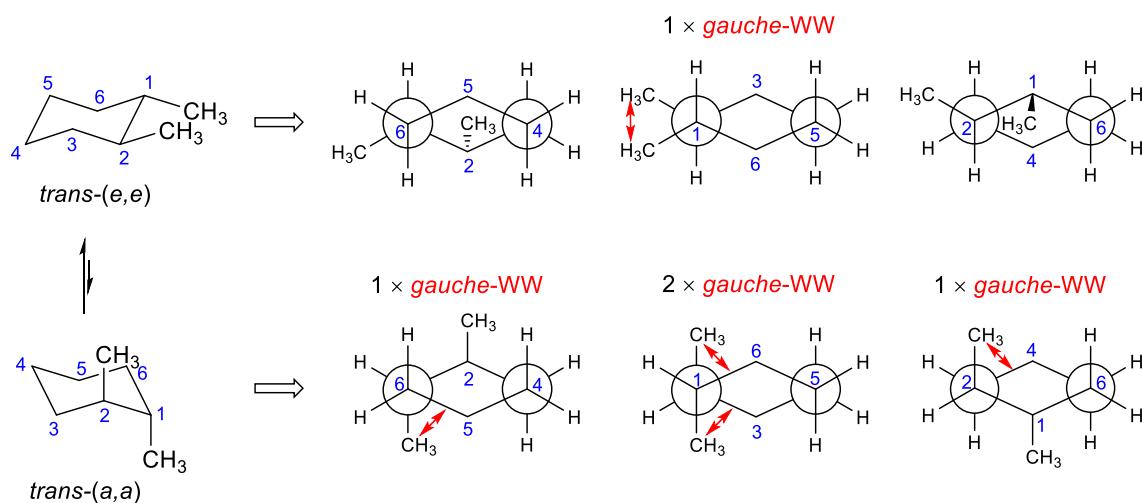


3. Zeichnen Sie das *cis*- und die beiden Konformere von *trans*-1,2-Dimethylcyclohexan zunächst als perspektivische Strichformeln. Zeigen sie für die drei Konformere alle *gauche*-WW unter Beteiligung der Methylgruppen anhand der doppelten Newman-Projektionen, jeweils mit Blickrichtung entlang der Bindungen C(6)–C(1) und C(4)–C(3), C(1)–C(2) und C(5)–C(4), C(2)–C(3) und C(6)–C(5), auf.

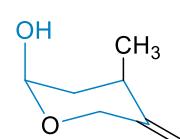
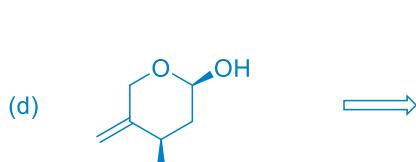
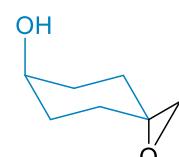
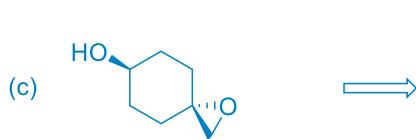
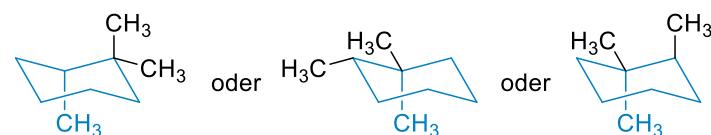
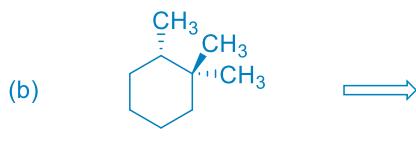
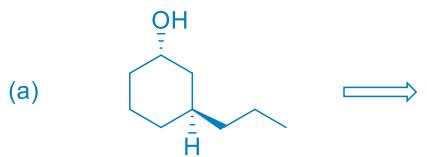
cis-1,2-Dimethylcyclohexan (3 *gauche*-Wechselwirkungen):



trans-1,2-Dimethylcyclohexan (1 bzw. 4 *gauche*-Wechselwirkung im diäquatorialen und diaxialen Konformer):

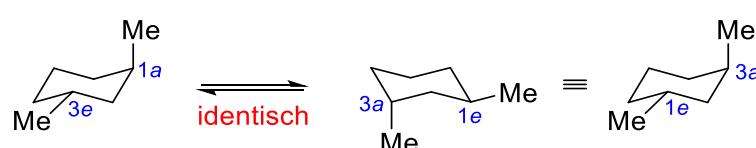


4. Vervollständigen Sie die folgenden Sesselkonformationen:



5. Geben Sie die stereochemische Beziehung (identisch/Diastereomere/Enantiomere) zwischen den beiden Sesselkonformeren der folgenden substituierten Cyclohexane an:

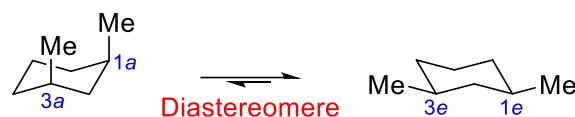
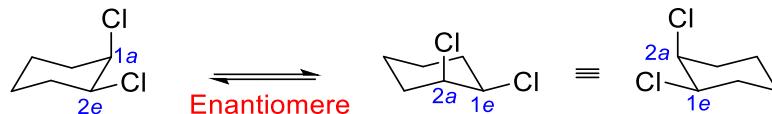
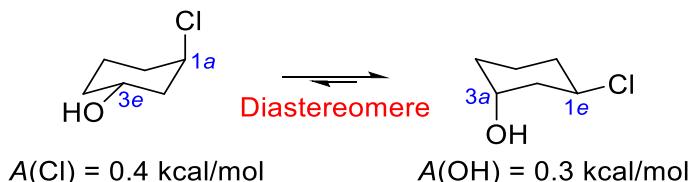
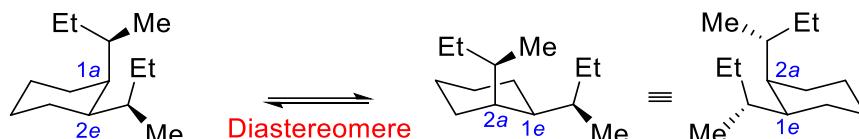
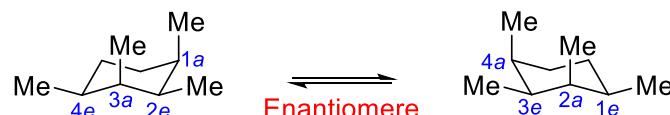
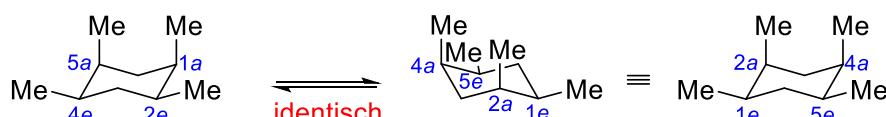
(a) *trans*-1,3-Dimethylcyclohexan



(b) *cis*-1-Chlor-3-methylcyclohexan



(c) *cis*-1,3-Dimethylcyclohexan

(d) *cis*-1,2-Dichlorocyclohexan(e) *trans*-3-Chlorocyclohexan-1-ol(f) *cis*-1,2-Bis-[*(R*)-1-methylpropyl]cyclohexan(g) all-*cis*-1,2,4-Trimethylcyclohexan(h) all-*cis*-1,2,3,4-Tetramethylcyclohexan(i) all-*cis*-1,2,4,5-Tetramethylcyclohexan(j) all-*cis*-1,2,3,4,5-Pentamethylcyclohexan

6. Ein Vergleich der ax/äq-Energiedifferenzen (A-Parameter) für Methyl, Ethyl und Isopropyl zeigt einen stetigen Anstieg: 1.7, 1.8 und 2.1 kcal/mol. Der Wert für die *tert*-Butylgruppe steigt dagegen sprunghaft auf 5.5 kcal/mol an. Erklären Sie diese Tatsache anhand von Zeichnungen der axialen Konformere von Isopropylcyclohexan und *tert*-Butylcyclohexan.

Die Isopropylgruppe kann die übermässigen sterischen Wechselwirkungen dadurch ausweichen, dass die beiden Methylgruppen den H-Atomen 3 und 5 des Cyclohexanrings abgewandt werden. Eine solche Ausweichmöglichkeit ist im *tert*-Butylcyclohexan nicht mehr gegeben.

