



# ACOC I Übungsstunde: Konformationsanalyse

**Dominik Gtz**

27. November 2023



# Outline

1. Wie gehts?
2. Thermochemie Anhang
3. Active Recall: Topizität
4. Konformationsanalyse
  - Newman-Projektion
  - Ringförmige Moleküle
5. Serie 10
6. Feedback
7. Mental Health

# Outline

1. Wie gehts?

2. Thermochemie Anhang

3. Active Recall: Topizität

4. Konformationsanalyse  
Newman-Projektion  
Ringförmige Moleküle

5. Serie 10

6. Feedback

7. Mental Health

# Wie gehts?

- Wie gehts?
  - Ich habe gerade etwas Stress, daher schaffe ich es nicht ganz, eure Serien diese Woche zu korrigieren.
- Wie fandet ihr die letzte Serie? *zu schwer? gut verstanden*
- Wie fandet ihr Polyball? *-> Wer war da?*
  - Ich fand's schön :)
- Wie findet ihr die Musterlösungen?

*↳ verständlich oder Anwältin: Ihr eure mehr cofidence?*

# Outline

1. Wie gehts?

2. Thermochemie Anhang

3. Active Recall: Topizität

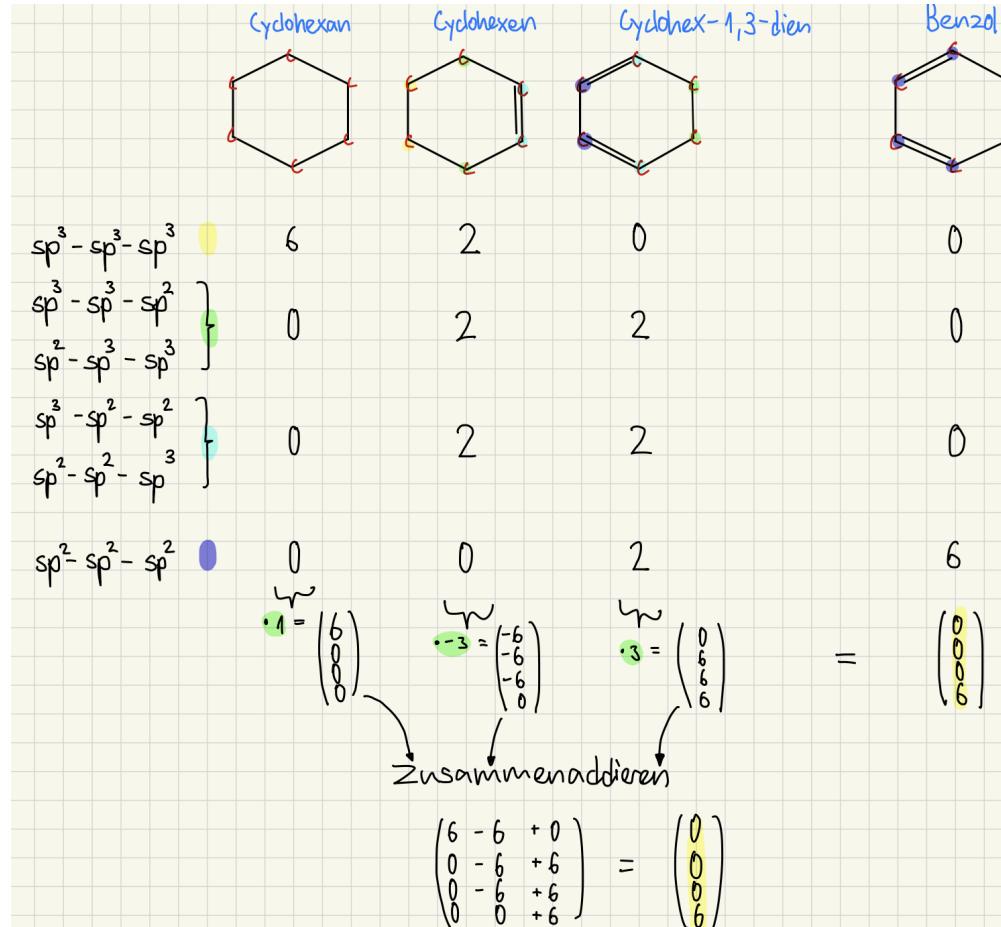
4. Konformationsanalyse  
Newman-Projektion  
Ringförmige Moleküle

5. Serie 10

6. Feedback

7. Mental Health

# Methode für Homodesmische Reaktionen (von Visva)



# Outline

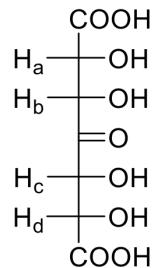
1. Wie gehts?
2. Thermochemie Anhang
3. Active Recall: Topizität
4. Konformationsanalyse  
Newman-Projektion  
Ringförmige Moleküle
5. Serie 10
6. Feedback
7. Mental Health

# Active Recall: Topizität

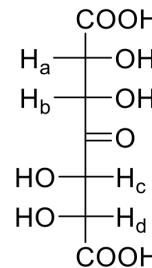
*Rot ⚡ macht eraußbuer*

## 2.2 Topizität und Stereochemie (10 Punkte)

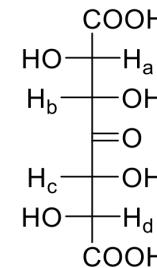
- a) Geben Sie die Topizitäten der gefragten Wasserstoffatome in der Tabelle an: Homotop (H), enantiotop (E), diastereotop (D) oder verschieden (V). (6 Punkte)



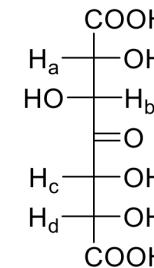
A



B



C



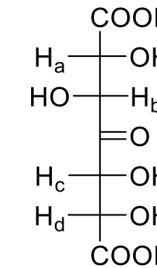
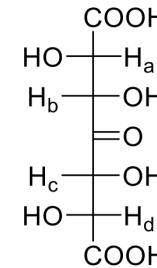
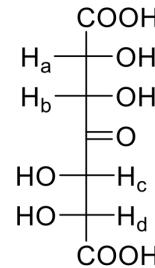
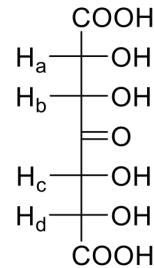
D

	A	B	C	D
H <sub>a</sub> zu H <sub>b</sub>				
H <sub>b</sub> zu H <sub>c</sub>				
H <sub>a</sub> zu H <sub>d</sub>				

# Active Recall: Topizität

## 2.2 Topizität und Stereochemie (10 Punkte)

a) Geben Sie die Topizitäten der gefragten Wasserstoffatome in der Tabelle an: Homotop (H), enantiotop (E), diastereotop (D) oder verschieden (V). (6 Punkte)



A

B

C

D

	A	B	C	D
H <sub>a</sub> zu H <sub>b</sub>	V	V	V	V
H <sub>b</sub> zu H <sub>c</sub>	E	H	E	D
H <sub>a</sub> zu H <sub>d</sub>	E	H	E	D

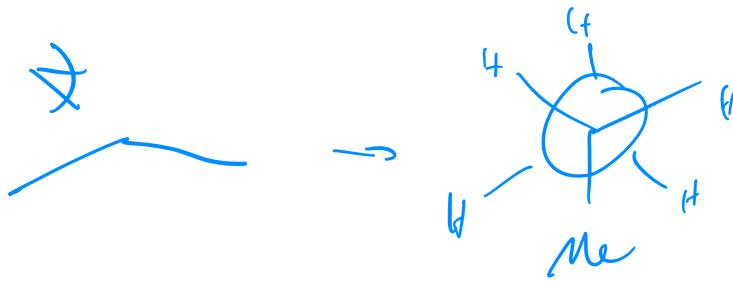
# Outline

1. Wie gehts?
2. Thermochemie Anhang
3. Active Recall: Topizität
4. Konformationsanalyse  
Newman-Projektion  
Ringförmige Moleküle
5. Serie 10
6. Feedback
7. Mental Health

# Warum brauche ich das?

Eine Reaktion nimmt immer den Weg, bei dem der Übergangszustand die niedrigste Energie hat. Können wir also für das Produkt den Zustand niedrigster Energie finden, sind wir schon gut dabei zu verstehen, wo die Reaktion stattfinden kann.

# Von und zu Newman

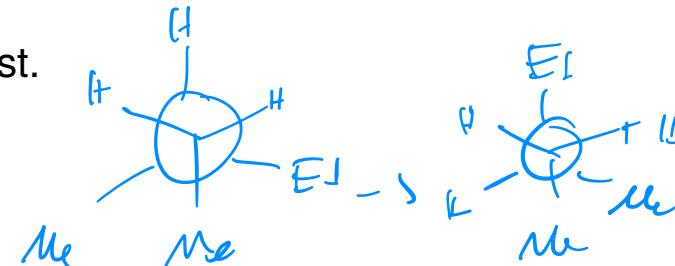


Von Skelett zu Newman:

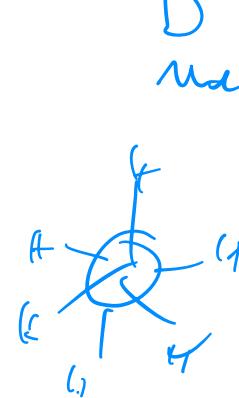
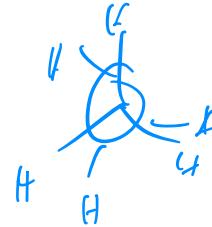
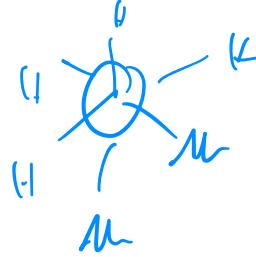
- Schau entlang einer Bindung
- In welcher Hand sind gegebenenfalls die Substituenten?
- Einzeichnen

Von Newman zu Skelett:

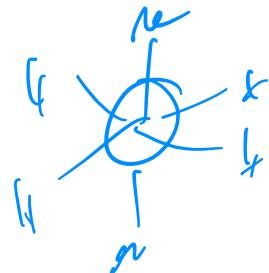
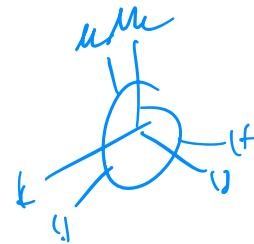
- Drehe Substituenten so, dass die mit meisten C gegenüber und vertikal sind. So liegt die Hauptkette direkt in der Ebene.
- Zeichne die Hauptkette.
- Überlege entlang welcher Bindung du schaust.
- In welcher Hand sind die Substituenten?



# Nomenklatur für Newman-Projektion



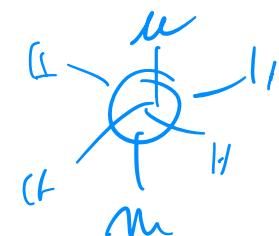
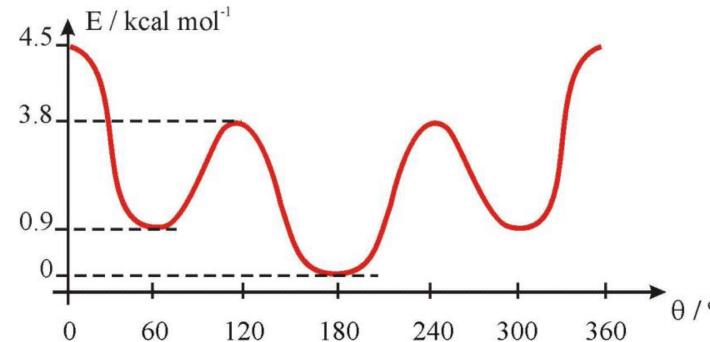
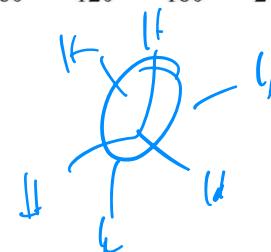
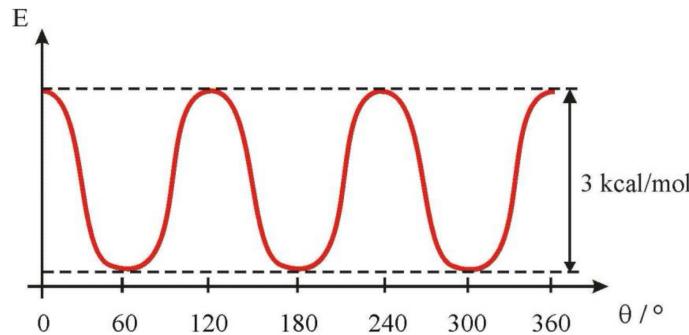
- Gauche / synclinical: Abstoßung benachbarter Substituenten in Newman
- Verdeckt, ekliptisch / eclipsed: Alle Substituenten stehen hintereinander. Diederwinkel von 0.
- Gestaffelt / staggered: Wenn alle Substituenten gleich viel Abstand zueinander haben.
- Synperiplanar: Zwei Substituenten zeigen in die gleiche Richtung.
- Antiperiplanar: Zwei Substituenten zeigen voneinander weg.



# Energie Diagramme

Was passiert hier?

- Trage Winkel aus Anfangszustand gegen Energie auf.
- Mit anderen Substituenten wird es schwerer.

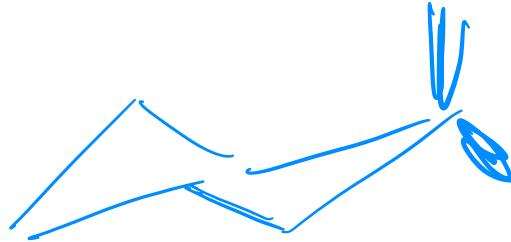


# Ringförmige Moleküle

Wichtigste Beispiel ist Cyclohexan, daher schauen wir uns jetzt nur das an. Die anderen cyclischen Kohlenwasserstoffe machen nicht viel anders.

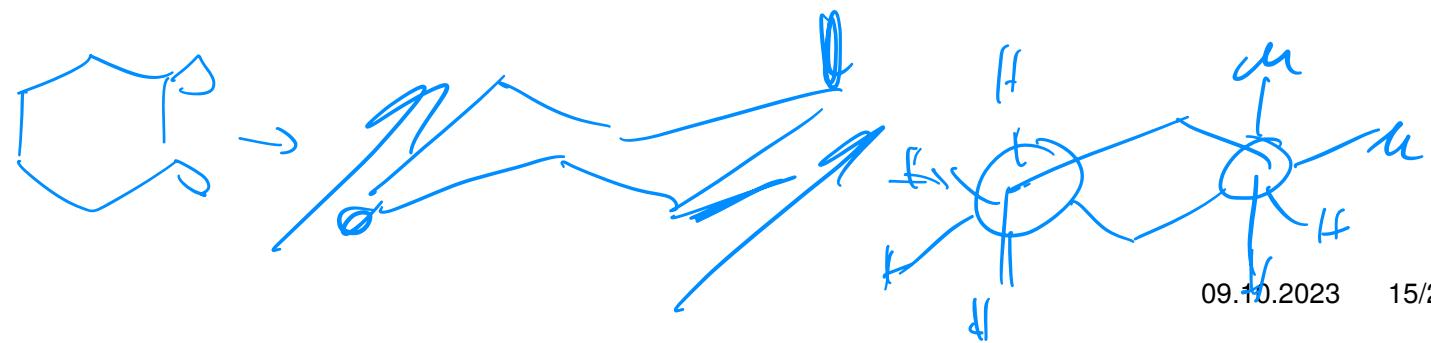
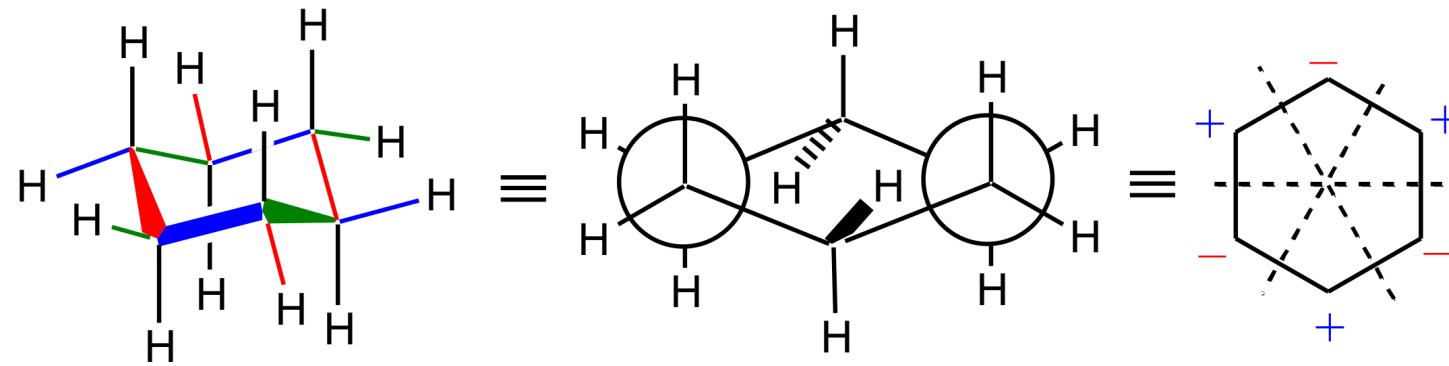
Es gibt zwei Konformationen mit niedrigster Energie:

- Axial
- Äquatorial

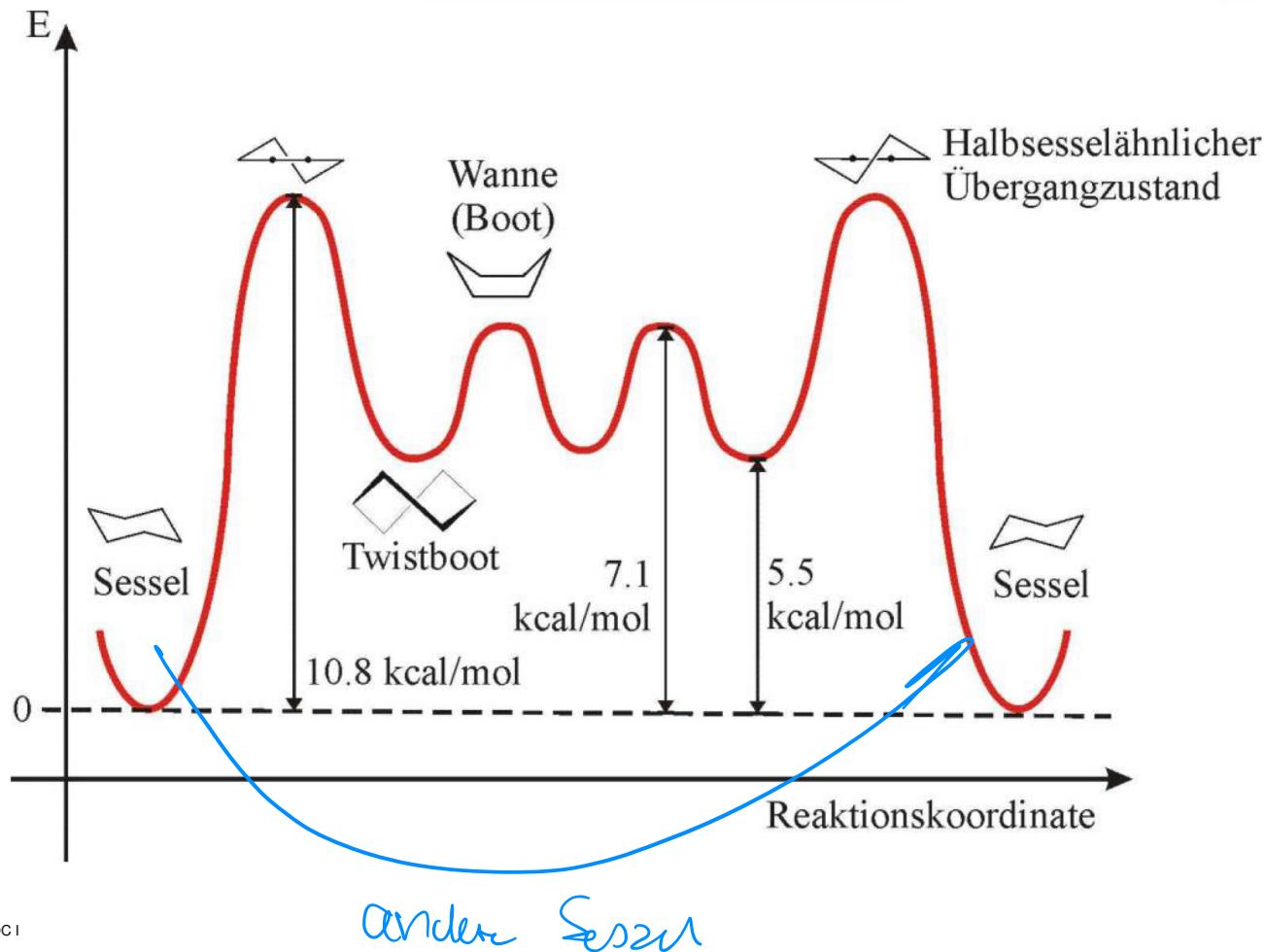


# Doppelte Newman-Projektion

Beachte Flagpole WW:

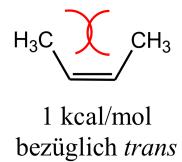
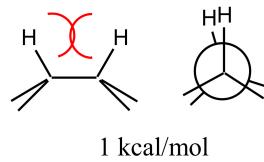


# Cyclohexan Konformationen

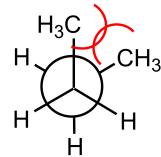


# Welche Interaktionen gibt es?

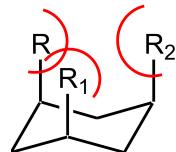
- Ekliptische Abstoßung / Pitzer-Spannung:



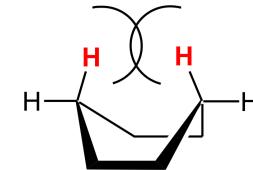
- Bayer-Spannung: Ringspannung
- Gauche-Interaktion:



- Diaxiale Wechselwirkung:

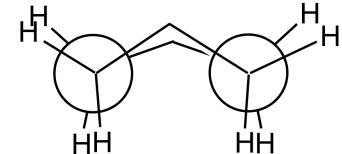


- Flagpole WW:



*flagpole H/H-Wechselwirkungen*

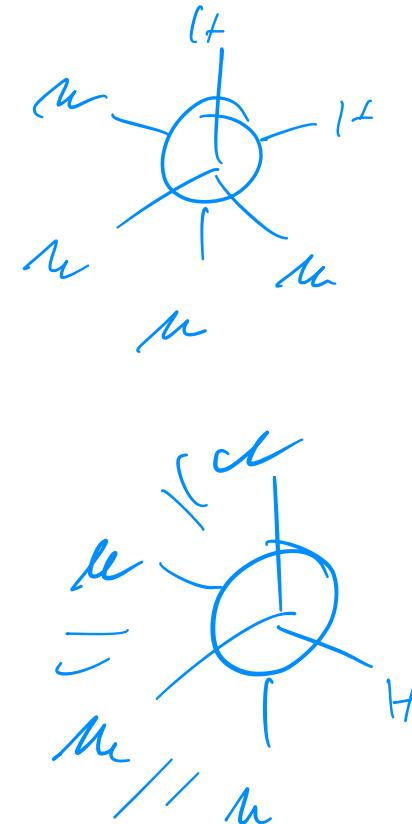
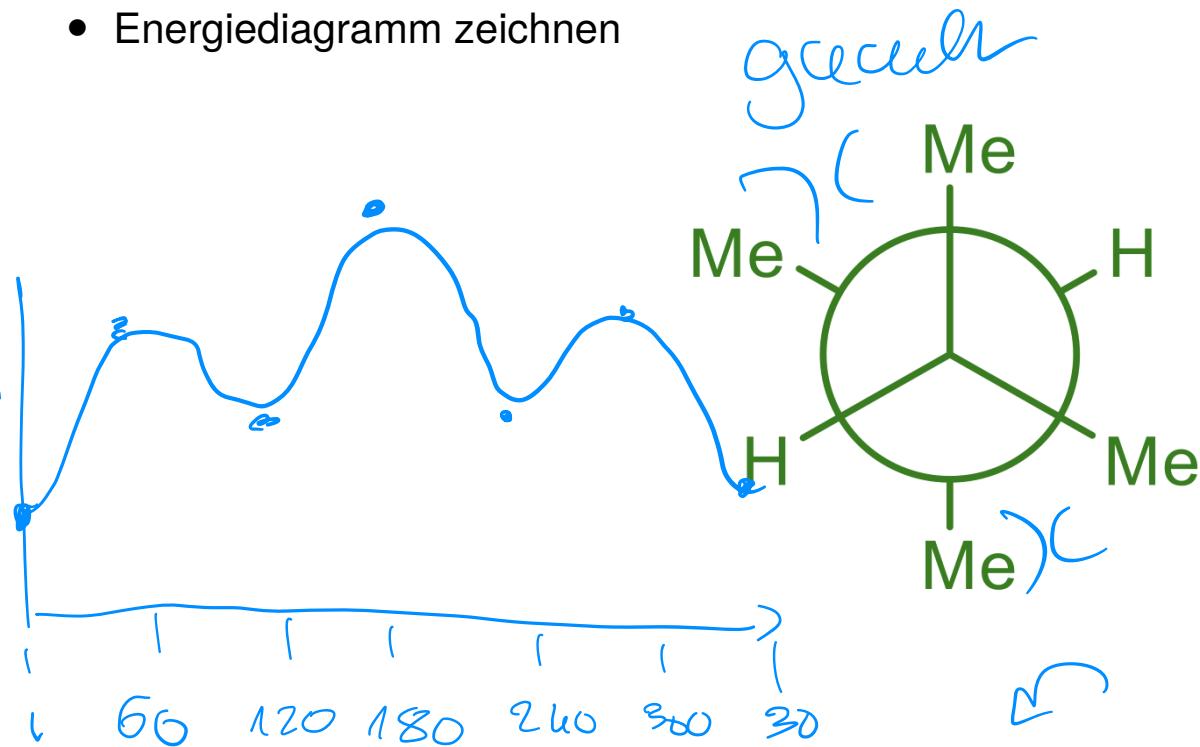
- Pitz-Spannung im Ring:



4 Pitzer-Spannungen

# Gemeinsame Aufgabe:

- Welche Interaktionen gibt es?
- Energiediagramm zeichnen



# Outline

1. Wie gehts?

2. Thermochemie Anhang

3. Active Recall: Topizität

4. Konformationsanalyse  
Newman-Projektion  
Ringförmige Moleküle

5. Serie 10

6. Feedback

7. Mental Health

# Priorität Serie 10

1. 3
2. 5
3. 2
4. 4
5. 1

# Tipps Serie 10

- 1: Zeichne die Skelettformel
- 2: Wo ist die Funktionelle Gruppe, mit der höchsten Priorität?
- 3: Zeichne für jede Konfiguration die Newman-Projektion und summiere dann die Energie auf
- 4: Müsst nicht die genauen Energie angeben, hier geht es mehr um das Konzept, anstatt um genaue Zahlen
- 5: Tabelle wie aus der Übungsstunde

# Outline

1. Wie gehts?
2. Thermochemie Anhang
3. Active Recall: Topizität
4. Konformationsanalyse  
Newman-Projektion  
Ringförmige Moleküle
5. Serie 10
6. Feedback
7. Mental Health

# Feedback

- Bitte füllt wieder das Feedback  aus, damit ich euch besser unterrichten kann :)

# Outline

1. Wie gehts?
2. Thermochemie Anhang
3. Active Recall: Topizität
4. Konformationsanalyse  
Newman-Projektion  
Ringförmige Moleküle
5. Serie 10
6. Feedback
7. Mental Health

# Mental Health

- Unter diesem Link  findet ihr Hilfe, falls es euch nicht gut geht.

**Vielen Dank für eure  
Aufmerksamkeit!**

**Dominik Gtz** dgoetz@ethz.ch