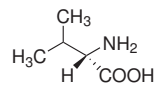
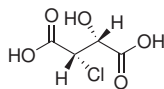
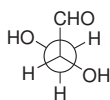


# Řešení úloh k tématu: Prostorové uspořádání molekul organických sloučenin

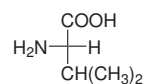
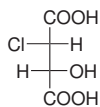
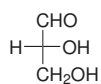
Jaromír Literák

Cvičení v převádění různých reprezentací prostorového uspořádání molekul

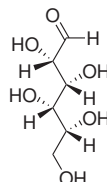
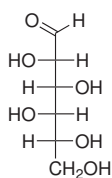
1. Řešení (každá struktura 0,5 b.).



Fischerova projekce:

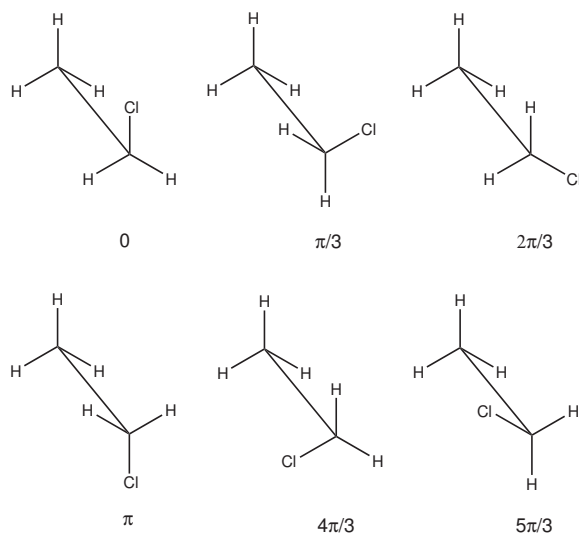


2. Řešení (1 b.).

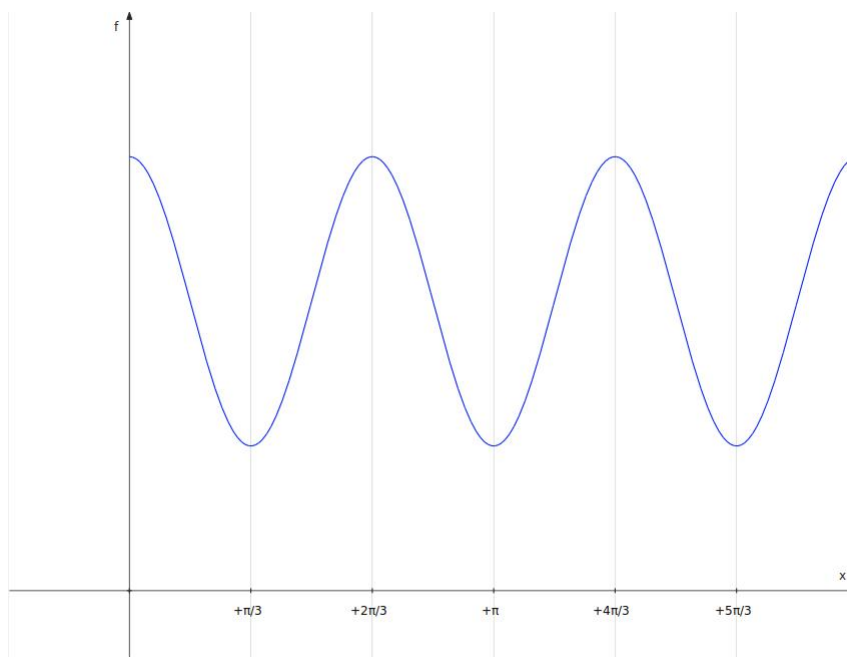


### Konformační analýza

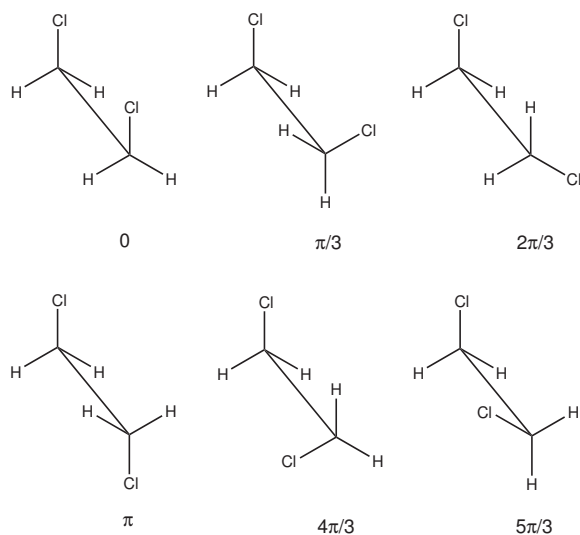
3. Minimum a maximum na křivce závislosti vnitřní energie molekuly *chlorethanu* na dihedrálním úhlu budou odpovídat následující konformace (**0,5 b.**):



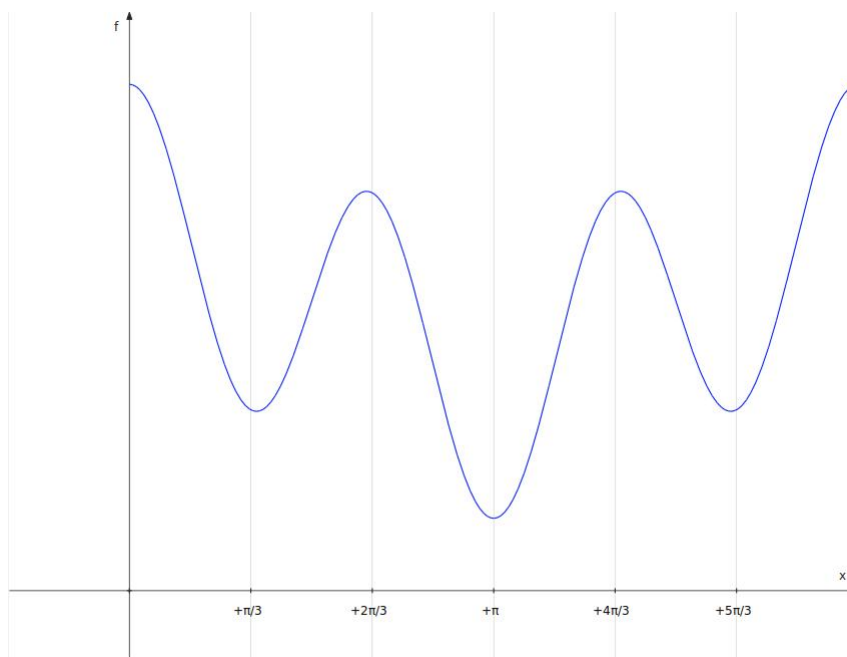
Křivka má podobný průběh jako u ethanu, jen je větší rozdíl mezi minimem a maximumem (**0,5 b.**):



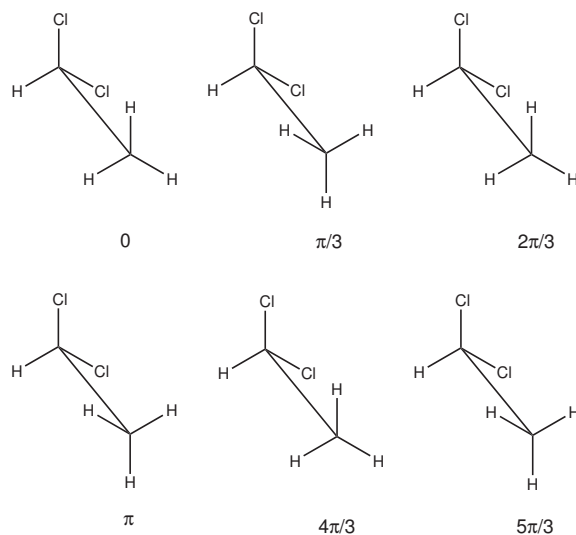
Minimum a maximum na křivce závislosti vnitřní energie molekuly *1,2-dichlorethanu* na dihedrálním úhlu budou odpovídat následující konformace (**0,5 b.**):



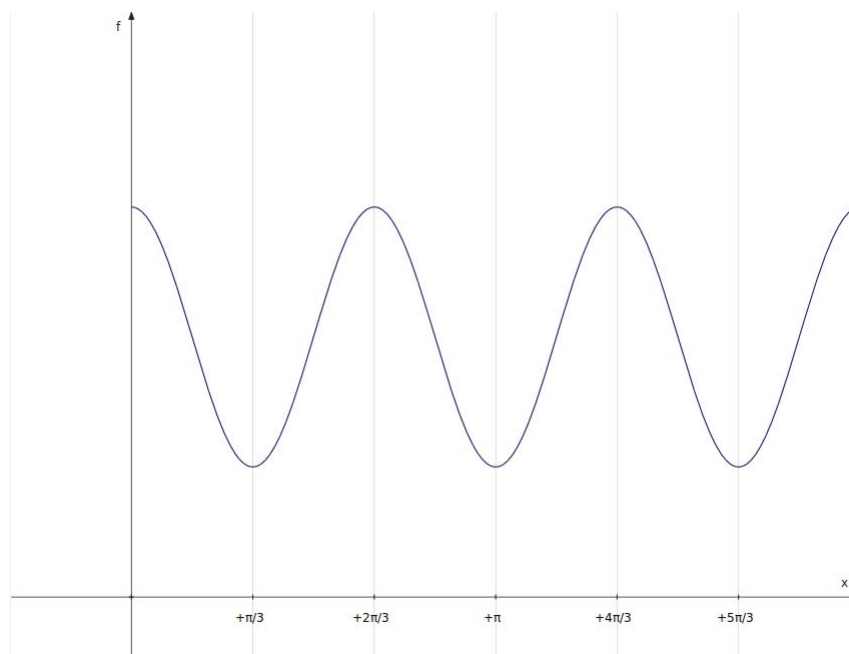
Všimněte si také, že některé extrémy nastávají u *1,2-dichlorethanu* v úhlu neodpovídajícímu přesně násobku  $\pi/3$  (**0,5 b.**):



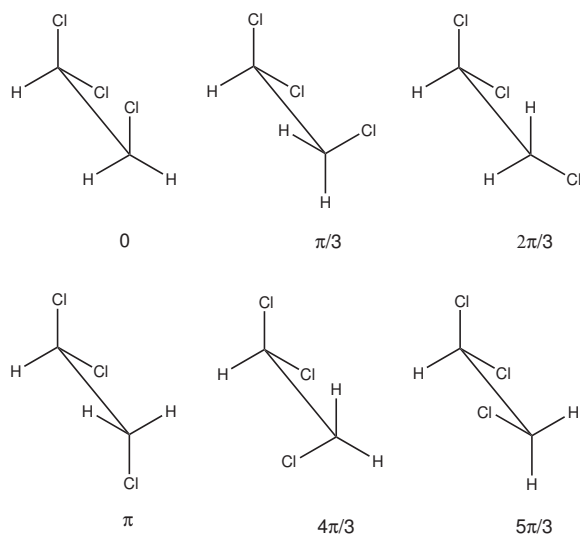
V případě 1,1-dichlorethanu odvodíme následující konformace pro maxima a minima (**0,5 b.**):



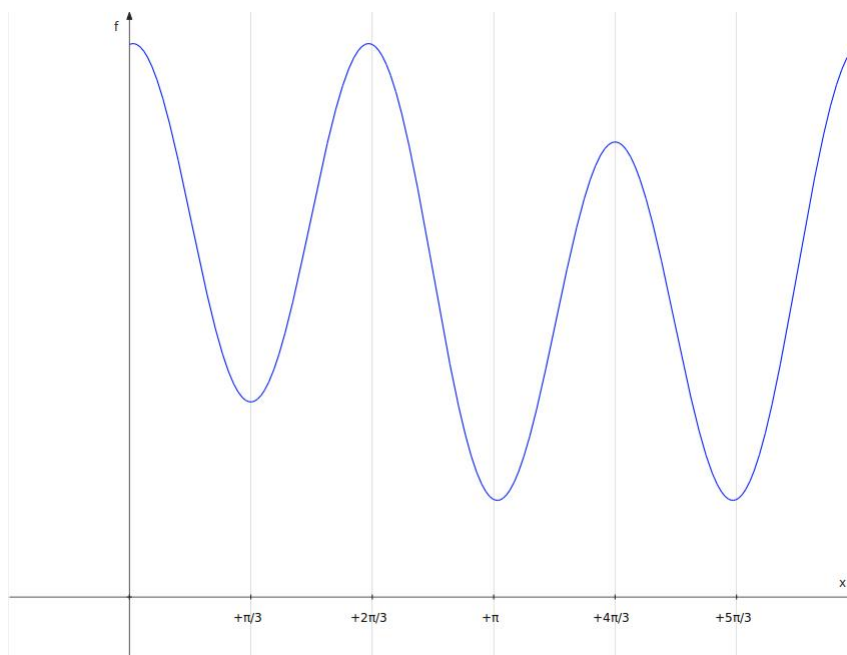
Závislost vnitřní energie molekuly na dihedrálním úhlu bude mít jednoduchý průběh (**0,5 b.**):



Minimum a maximum na křivce závislosti vnitřní energie molekuly *1,1,2-trichlorethanu* na dihedrálním úhlu budou odpovídat následující konformace (**0,5 b.**):

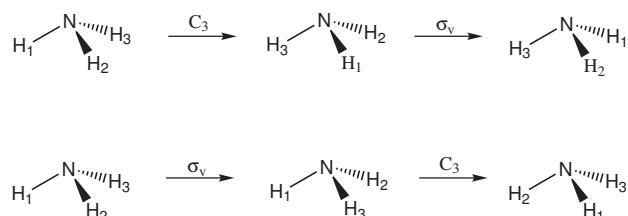


Následující obrázek pak ukazuje závislost vnitřní energie molekuly *1,1,2-trichlorethanu* na dihedrálním úhlu (**0,5 b.**):



## Symetrie molekul

4. Identita. Většina organických látek patří do bodové grupy symetrie  $C_1$ , která zahrnuje molekuly, které mají identitu jako jediný prvek symetrie. Všechny ostatní grupy symetrie také obsahují identitu. Z pěti možných prvků symetrie (rotační osa symetrie  $C_n$ , roviny symetrie  $\sigma$ , středu symetrie, rotačně-reflexní osy  $S_n$  a identity) ji proto můžeme identifikovat nejčastěji. U jedné molekuly můžeme samozřejmě najít více  $C_n$ ,  $S_n$  nebo  $\sigma$ , jejich počet u jedné molekuly však zde neuvažujeme (molekula může mít nekonečný počet některých prvků symetrie) (**0,5 b.**).
5. Operace symetrie nejsou obecně komutativní, jak ukazuje následující obrázek. Vertikální rovina symetrie je v tomto případě totožná s rovinou papíru (**0,5 b.**).



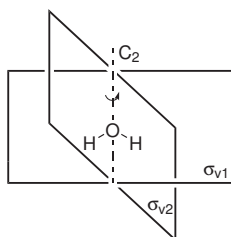
6. Molekula *kyanovodíku* je lineární, patří do bodové grupy symetrie  $C_{\infty v}$ . V molekule kromě identity můžeme najít rotační osu symetrie  $C_\infty$  a nekonečný počet vertikálních rovin symetrie  $\sigma_v$  (**1 b.**).



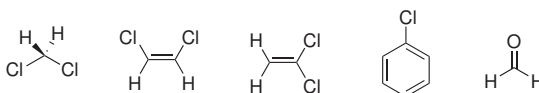
Stejnou symetrií se budou vyznačovat podobné lineární molekuly, např. halogenvodíky,  $\text{O}=\text{C}=\text{S}$  (**0,25 b.**). Autor našel tyto makroskopické objekty se stejnou symetrií (**0,25 b.**):



Molekula *vody* je lomená, patří do bodové grupy symetrie  $C_{2v}$ , můžeme v ní kromě identity identifikovat dvojčetnou rotační osu, která je zároveň hlavní osou molekuly, a dvě vertikální roviny symetrie  $\sigma_v$ , ve kterých leží hlavní osa molekuly (**1 b.**).



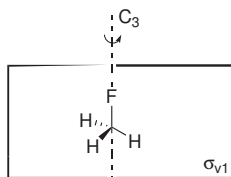
Můžeme najít poměrně velké množství molekul se stejnými symetrickými vlastnostmi, např. dichlormethan, *cis*-1,2-dichlorethen, 1,1-dichlorethen, chlorbenzen, formaldehyd... (**0,25 b.**)



Z makroskopických objektů pak stejnou symetrii mají například následující předměty (**0,25 b.**):



Atomy molekuly *fluormethanu* tvoří trojbokou pyramidu s atomem fluoru na vrcholu. Molekula patří do bodové grupy symetrie  $C_{3v}$ , hlavní osou molekuly je trojčetná rotační osa, která koinciduje s průsečíkem tří vertikálních rovin symetrie  $\sigma_v$ . Dalším prvkem symetrie je identita. Na obrázku je pro přehlednost zakreslena pouze jedna  $\sigma_v$ , další dvě roviny budou určeny vazbou C–F a vždy jednou z vazeb C–H, které neleží v rovině papíru (**1 b.**).



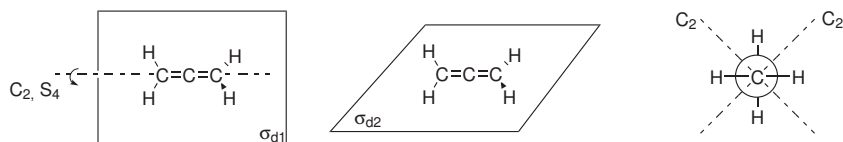
Stejné symetrické vlastnosti jako  $\text{CH}_3\text{F}$  má např. amoniak (**0,25 b.**).



Z makroskopických objektů pak stejnou symetrii jako fluormethan mají například následující předměty (**0,25 b.**):



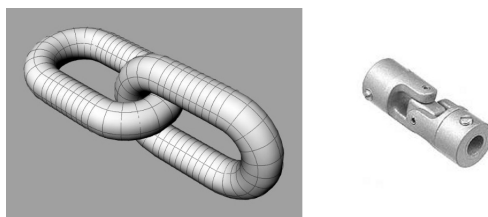
Prostorové uspořádání *allenu* (propa-1,2-dienu) bylo již prezentováno v doprovodném textu. Molekula patří do bodové grupy symetrie  $D_{2d}$ , kromě identity v ní najdeme dvočetnou hlavní rotační osu molekuly, která prochází všemi atomy uhlíku, další dvě  $C_2$  kolmé navzájem a kolmé k hlavní ose roviny a dvě roviny symetrie (diagonální) určené dvěma trojicemi atomů  $\text{H}-\text{C}-\text{H}$ . Navíc existuje v molekule čtyřčetná rotačně-reflexní osa  $S_4$ , která koinciduje s hlavní osou molekuly (**1 b.**).



Stejné symetrické vlastnosti jako allen má např. bifenyl v kolmém uspořádání fenylových jader, nebo některé spirosloučeniny (**0,25 b.**).



Z makroskopických objektů pak stejnou symetrii jako allen mají například následující předměty (**0,25 b.**):





7. Jakákoliv asymetrická molekula (**0,5 b.**).

