

# KONFORMACIONA

## ANALIZA

### II DEO: CIKLIČNI MOLEKULI

#### NAPOMENE:

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

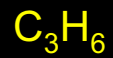
POJEDINI ATOMI I/ILI VEZE )

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

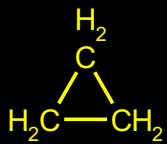
PRIKAZANE UNIFORMNO

3. PRIMENA BOJA NIJE UNIFORMNA

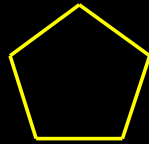
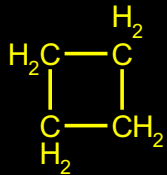
CIKLOALKANI : - OSNOVNI MONOCIKLIČNI SISTEMI SA 3 - 12 C ATOMA U PRSTENU



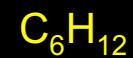
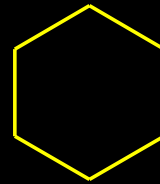
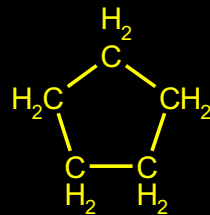
CIKLO-  
PROPAN



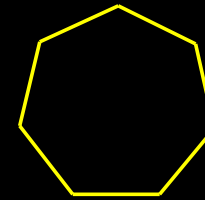
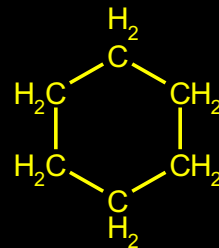
CIKLO-  
BUTAN



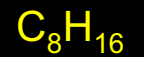
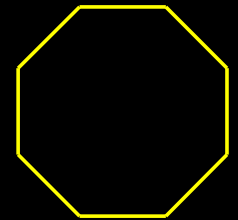
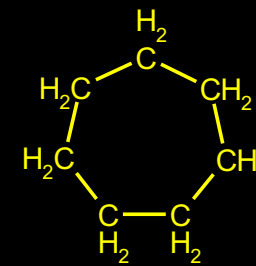
CIKLO-  
PENTAN



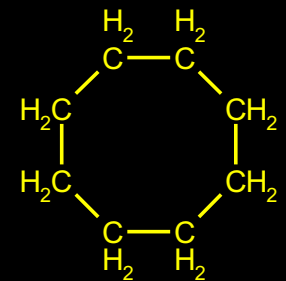
CIKLO-  
HEKSAN



CIKLO-  
HEPTAN

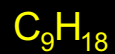
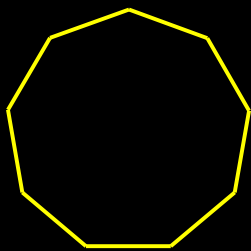


CIKLO-  
OKTAN

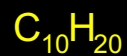
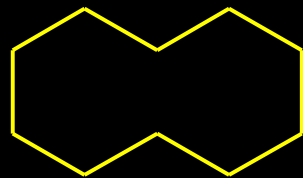


# -CIKLOALKANI : STRUKTURA, KONFORMACIJA I KONFIGURACIJA

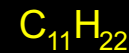
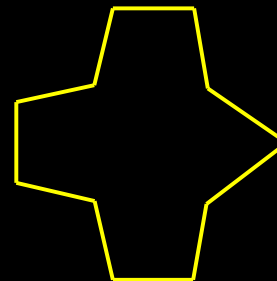
## - OSNOVNI MONOCIKLIČNI SISTEMI SA 3 - 12 C ATOMA U PRSTENU



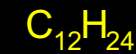
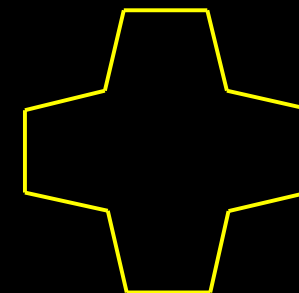
CIKLONONAN



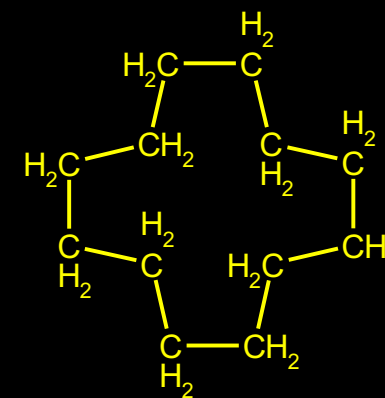
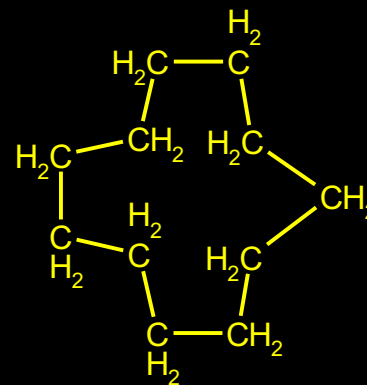
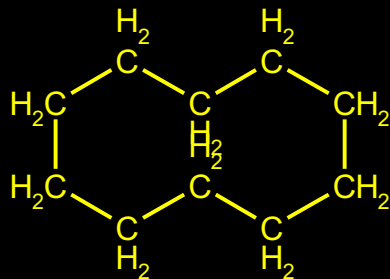
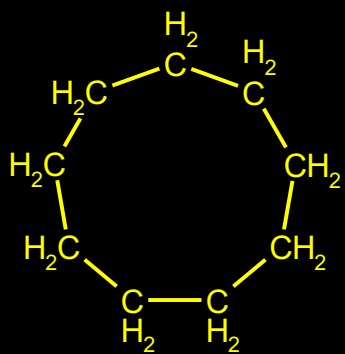
CIKLODEKAN



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 (s) 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 s 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.

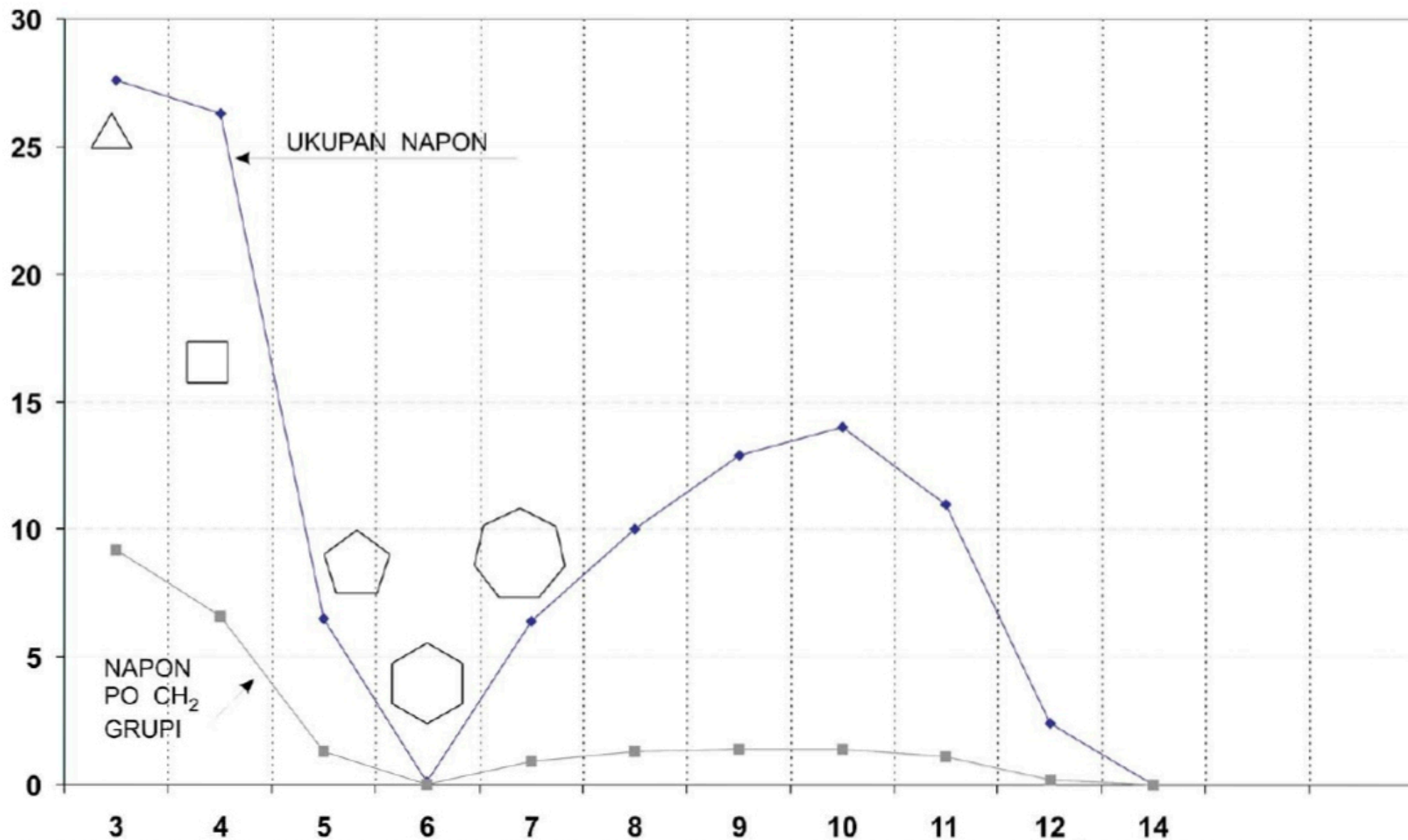
-PRI TOME, NIKADA NE DOLAZI DO RASKIDANJA BILO KOJE HEMIJSKE VEZE U MOLEKULU, VEĆ ISKLJUČIVO DO ROTACIJE OKO NJIH.

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

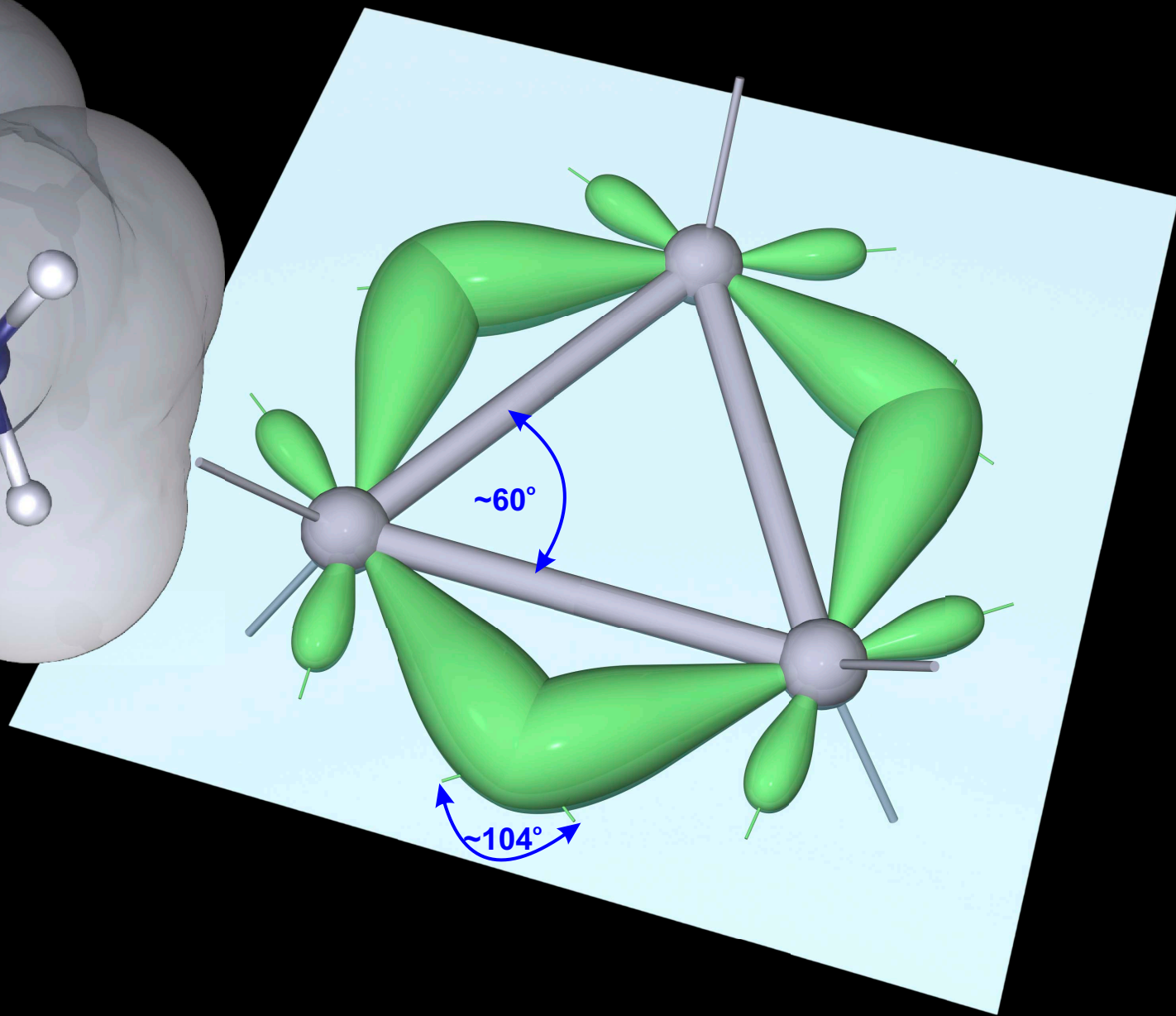
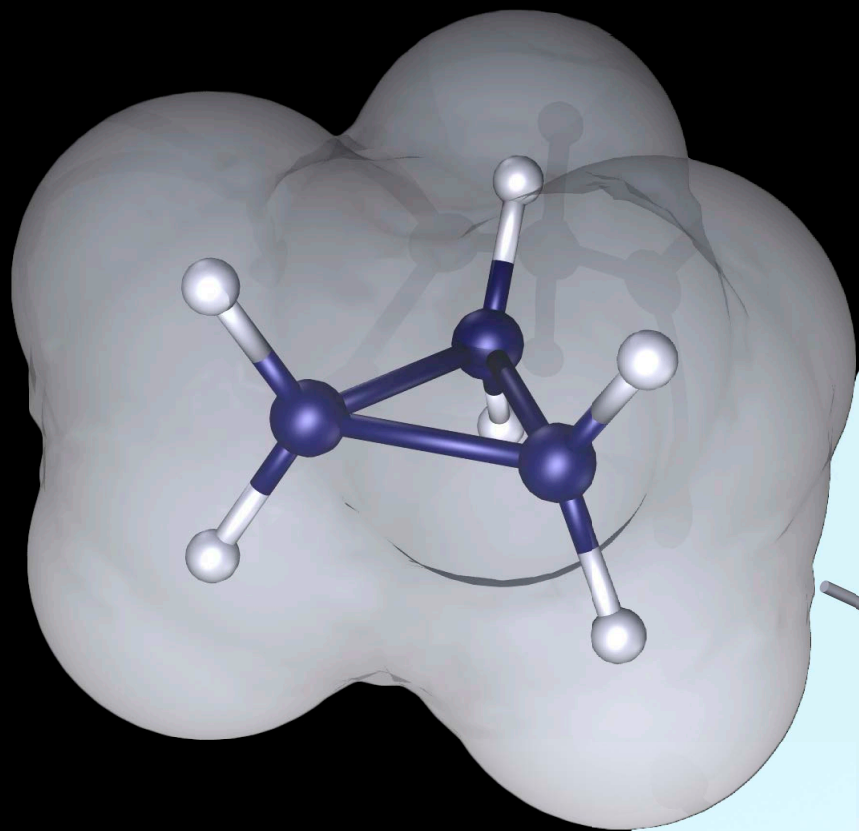
REALNA KONFORMACIJA MOLEKULA CIKLOALKANA NIJE PLANARNA (SUPROTNO ONOME ŠTO SUGERIŠU NJIHOVE PROJEKCIJE tj. 2D STRUKTURE.

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

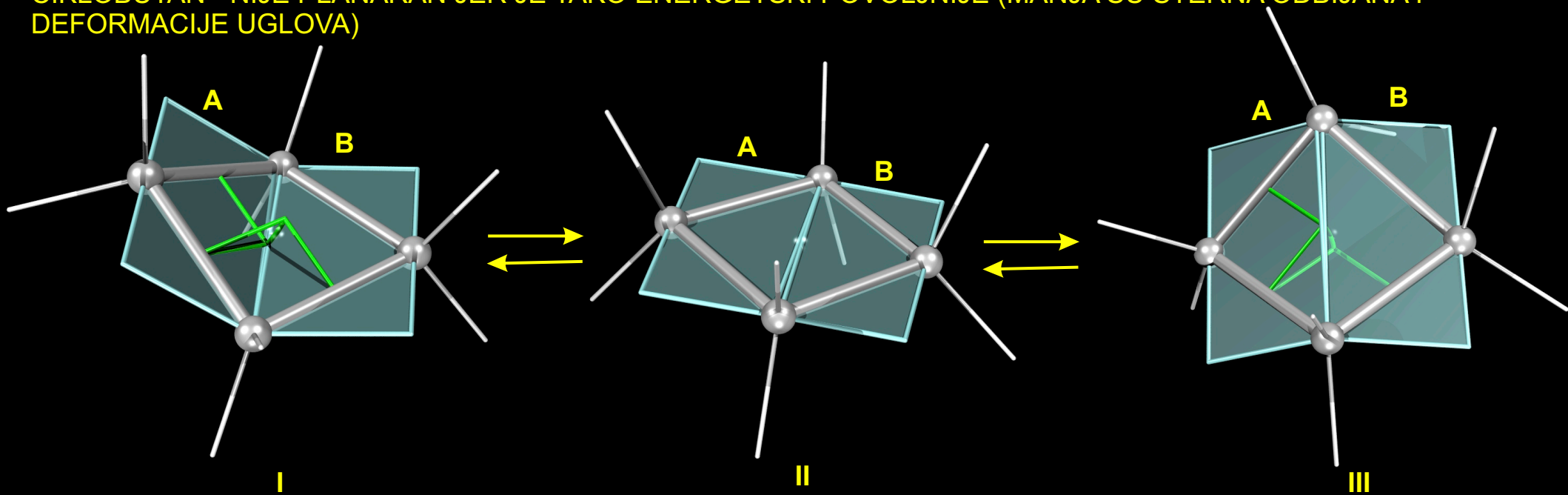
- 1) DA **ODSTUPANJE OD TETRAEDARSKOG UGLA** NA SVAKOM  $sp^3$  HIBRIDIZOVANOM **C** ATOMU **BUDE MINIMALNO**
- 2) DA MEĐUSOBNO **ODBIJANJE SVIH SUPSTITUENATA U MOLEKULU (ATOMA I GRUPA)** **BUDE MINIMALNO**
- 3) DA DUŽINA SVIH VEZA U MOLEKULU **MINIMALNO ODSTUPA OD IDEALNIH VREDNOSTI**



UKUPAN NAPON U PRSTENU I NAPON PO CH<sub>2</sub> GRUP. NAPON: RAZLIKA IZMEĐU IZRAČUNATE (IDEALNE) I EKSPERIMENTALNE VREDNOSTI ZA TOPLOTU SAGOREVANJA

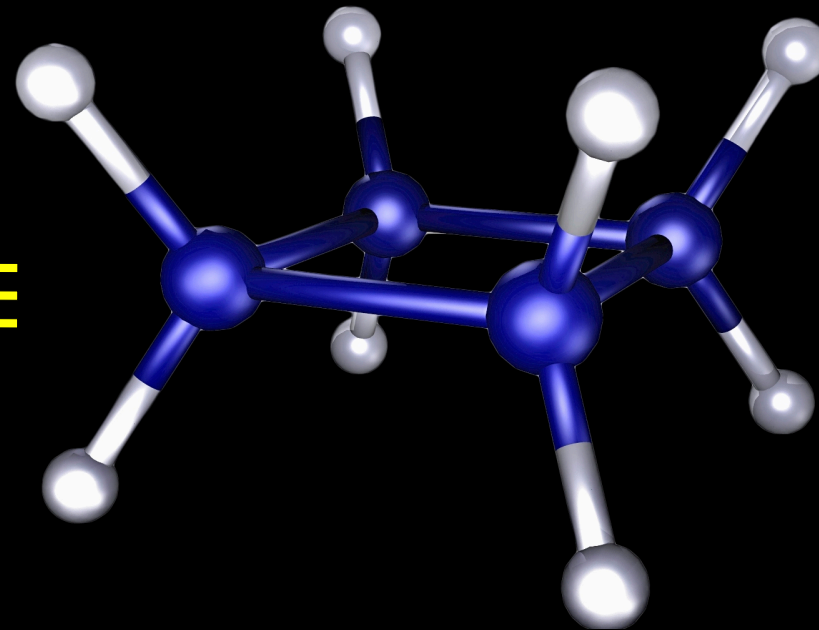
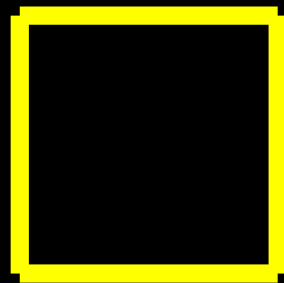


CIKLOBUTAN - NIJE PLANARAN JER JE TAKO ENERGETSKI POVOLJNIJE (MANJA SU STERNA ODBIJANA I DEFORMACIJE UGLOVA)



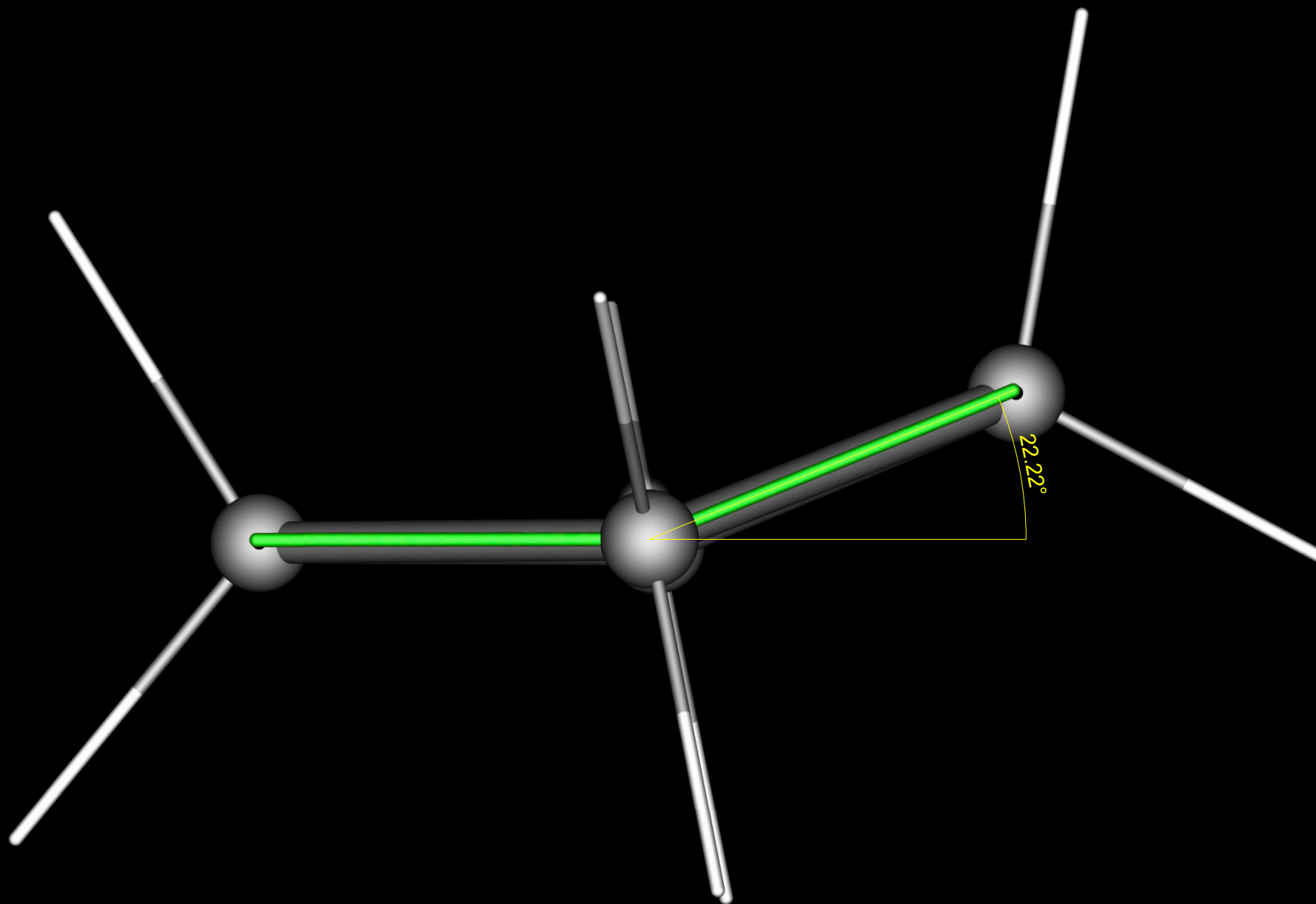
UGAO KOJI ZAKLAPAJU DVE RAVNI (A i B) JE  
 $26^\circ$  ZA KONFORMACIJU I,  
 $0^\circ$  ZA KONFORMACIJU II (PLANARNA)  
 $-26^\circ$  ZA KONFORMACIJU III.  
POD OBIČNIM USLOVIMA, KONFORMACIJE I i III BRZO

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

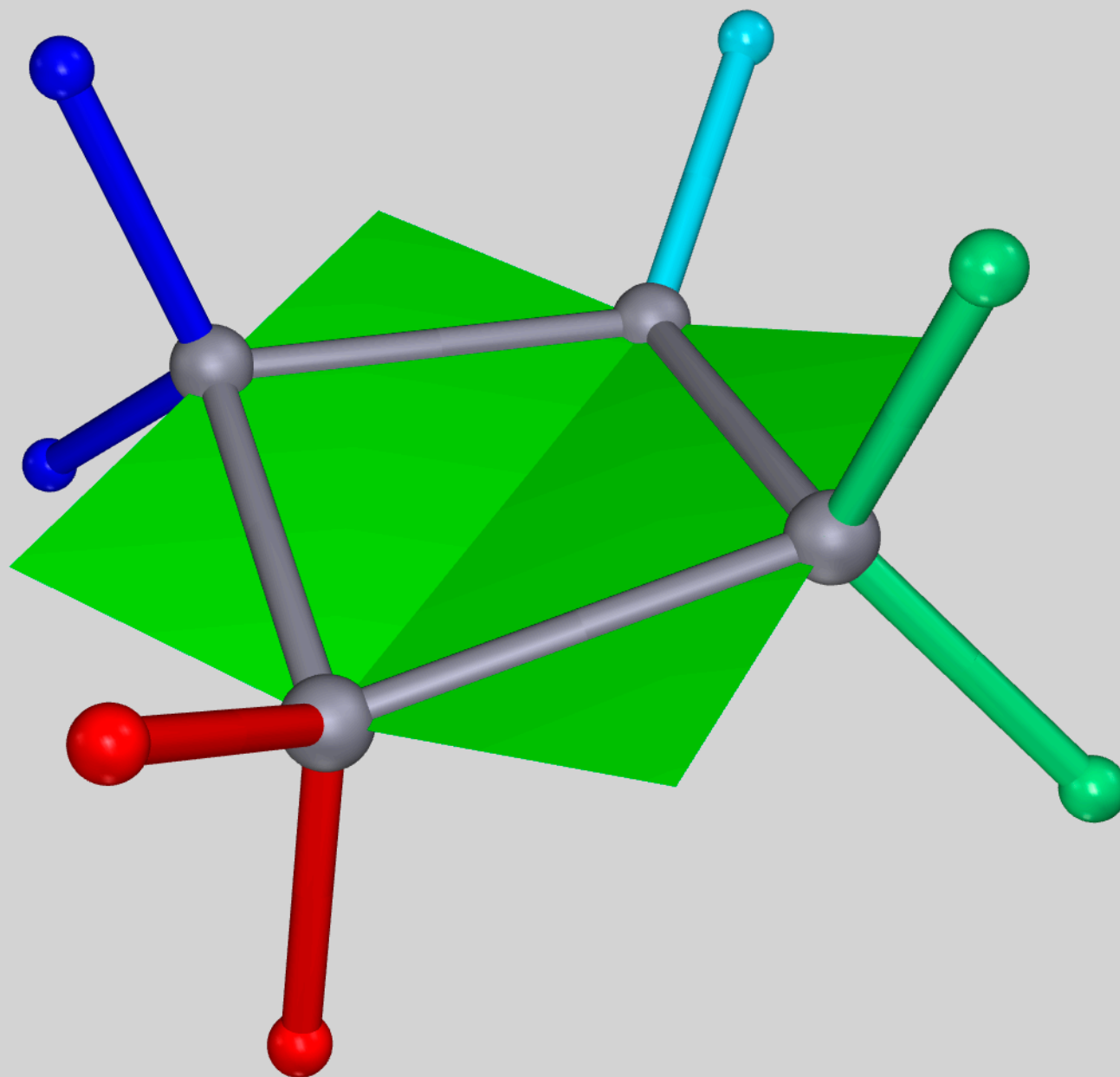




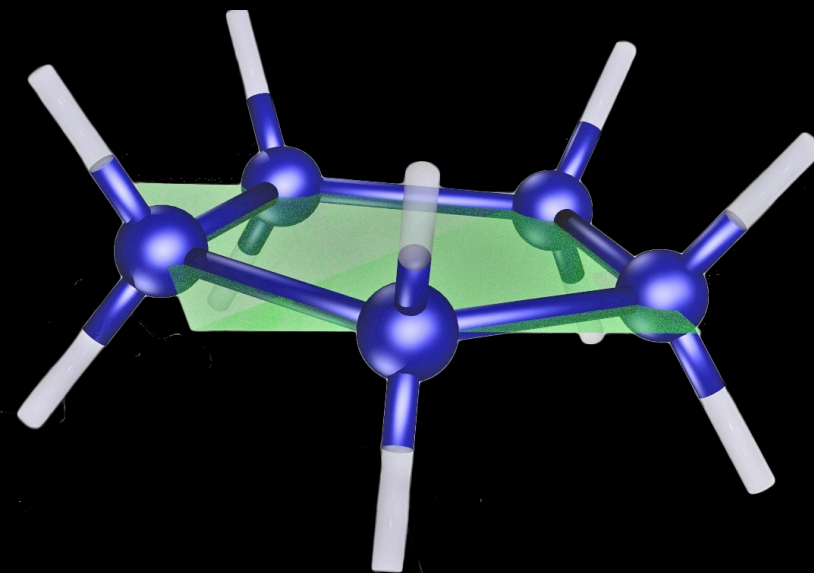
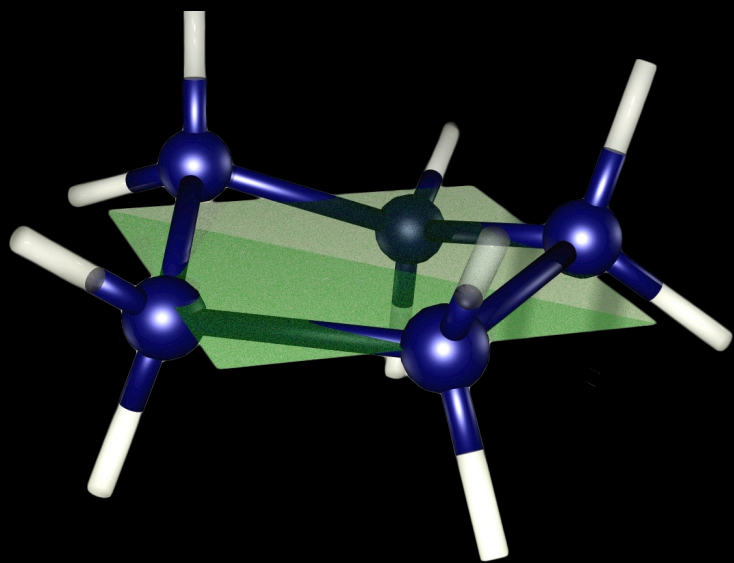
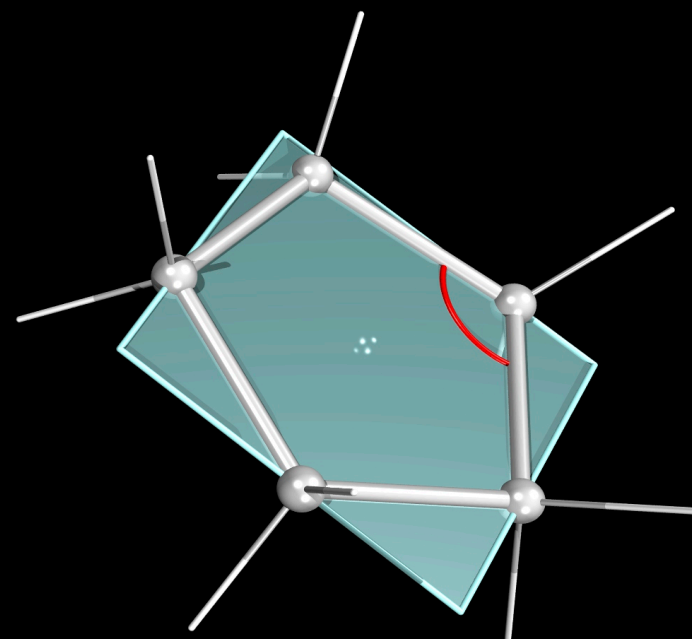
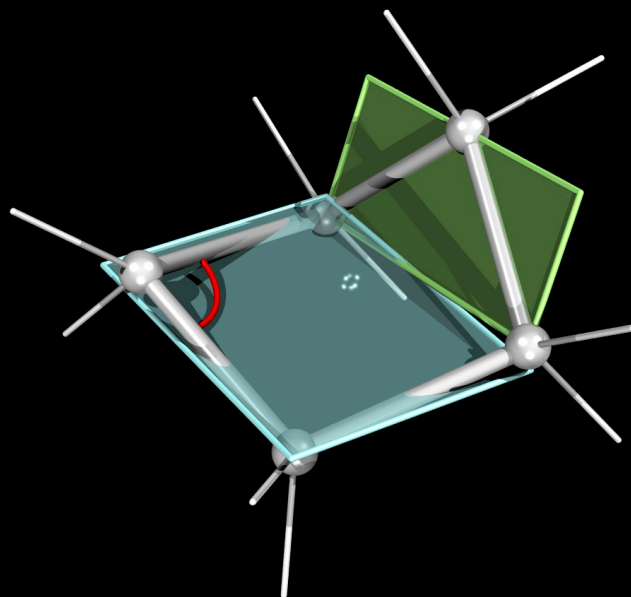
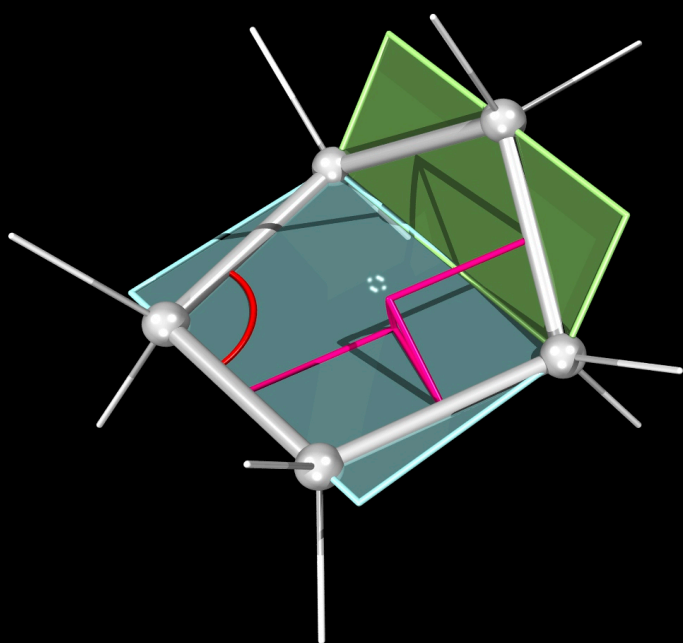
# CIKLOBUTAN - PROJEKCIJA



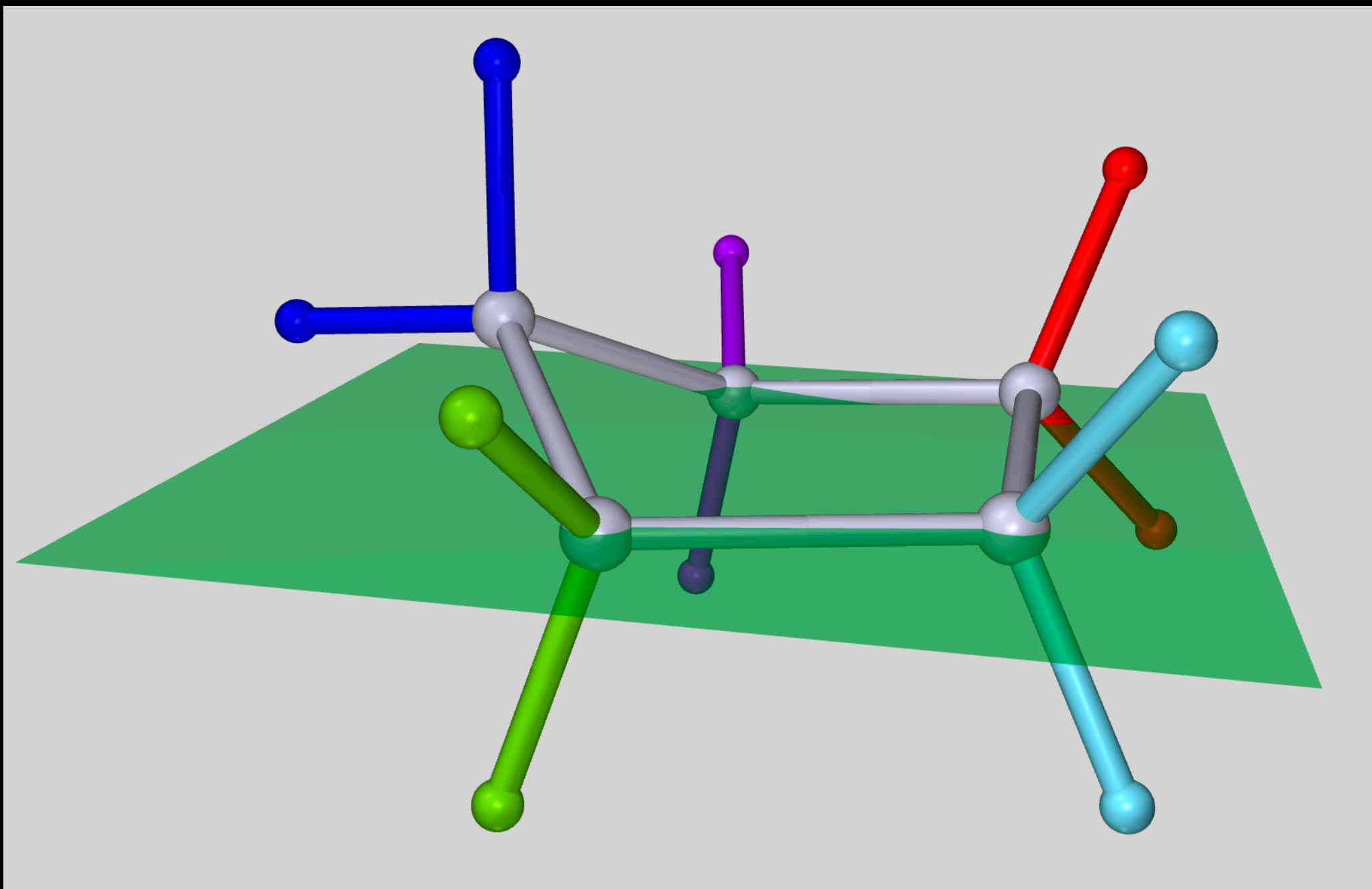
CIKLOBUTAN - 3D



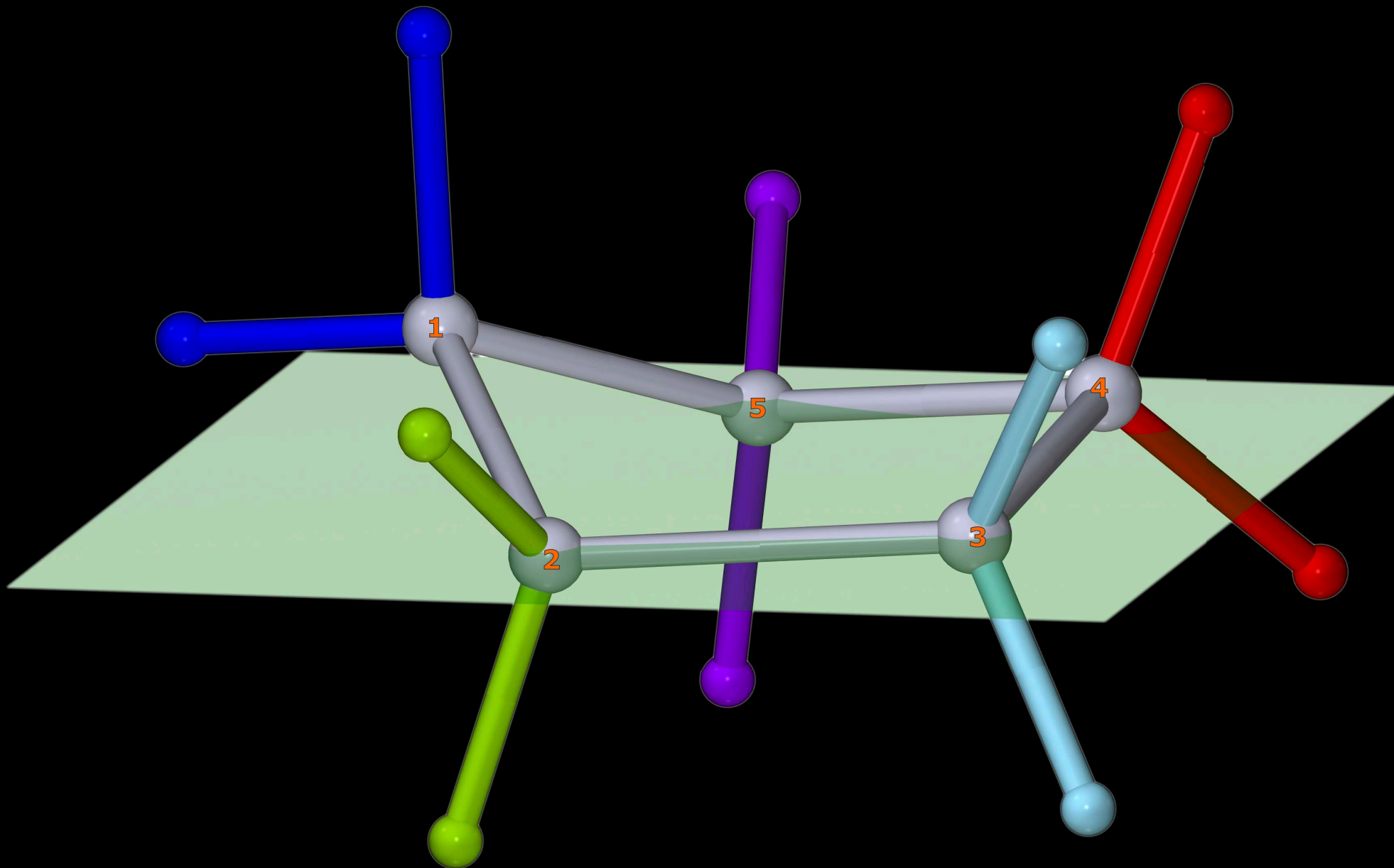
CIKLOPENTAN - NIJE PLANARAN JER JE TAKO ENERGETSKI POVOLJNIJE (MANJA SU STERNA ODBIJANA I DEFORMACIJE UGLOVA)



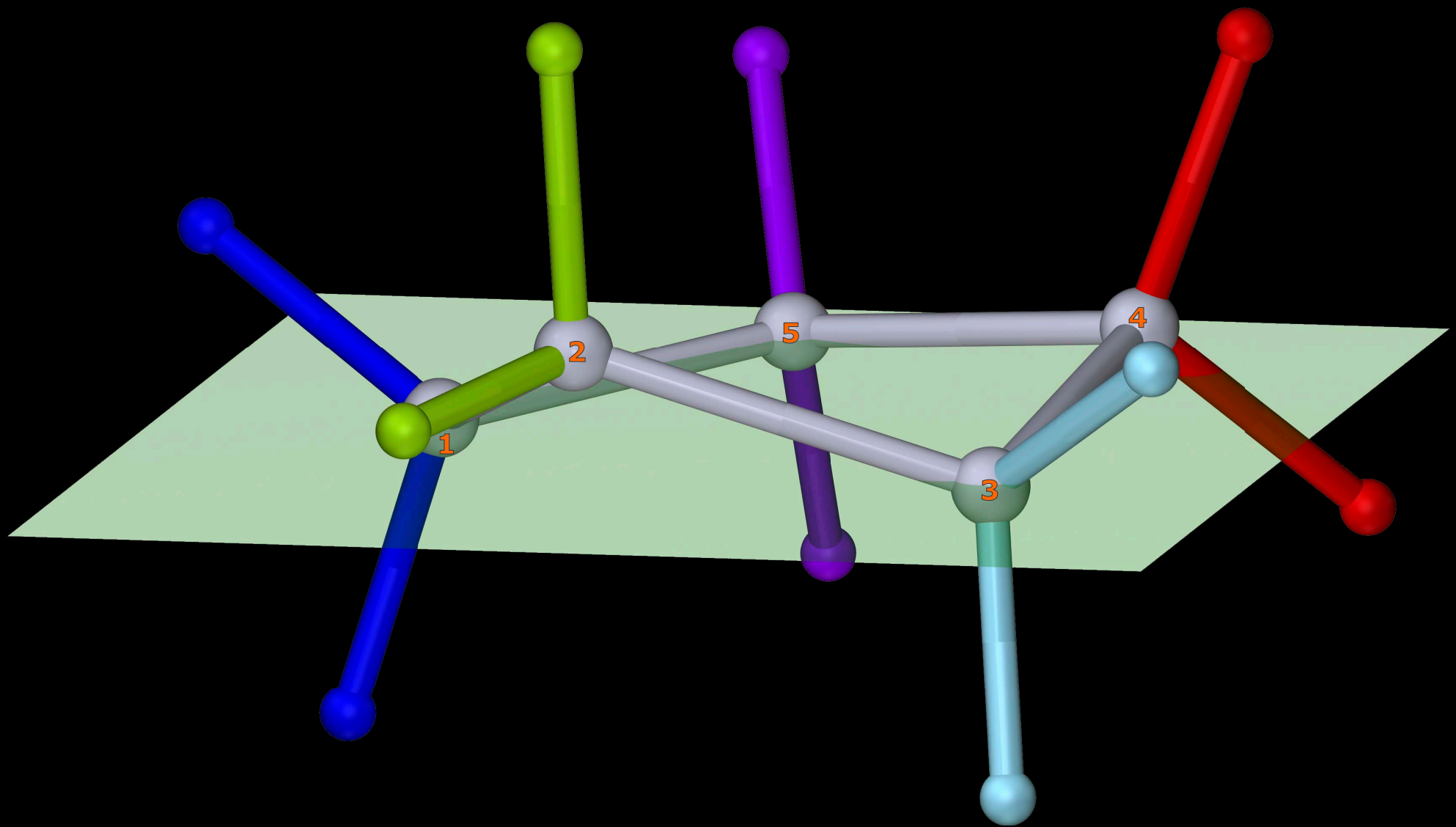
# CIKLOPENTAN - 3D MODEL



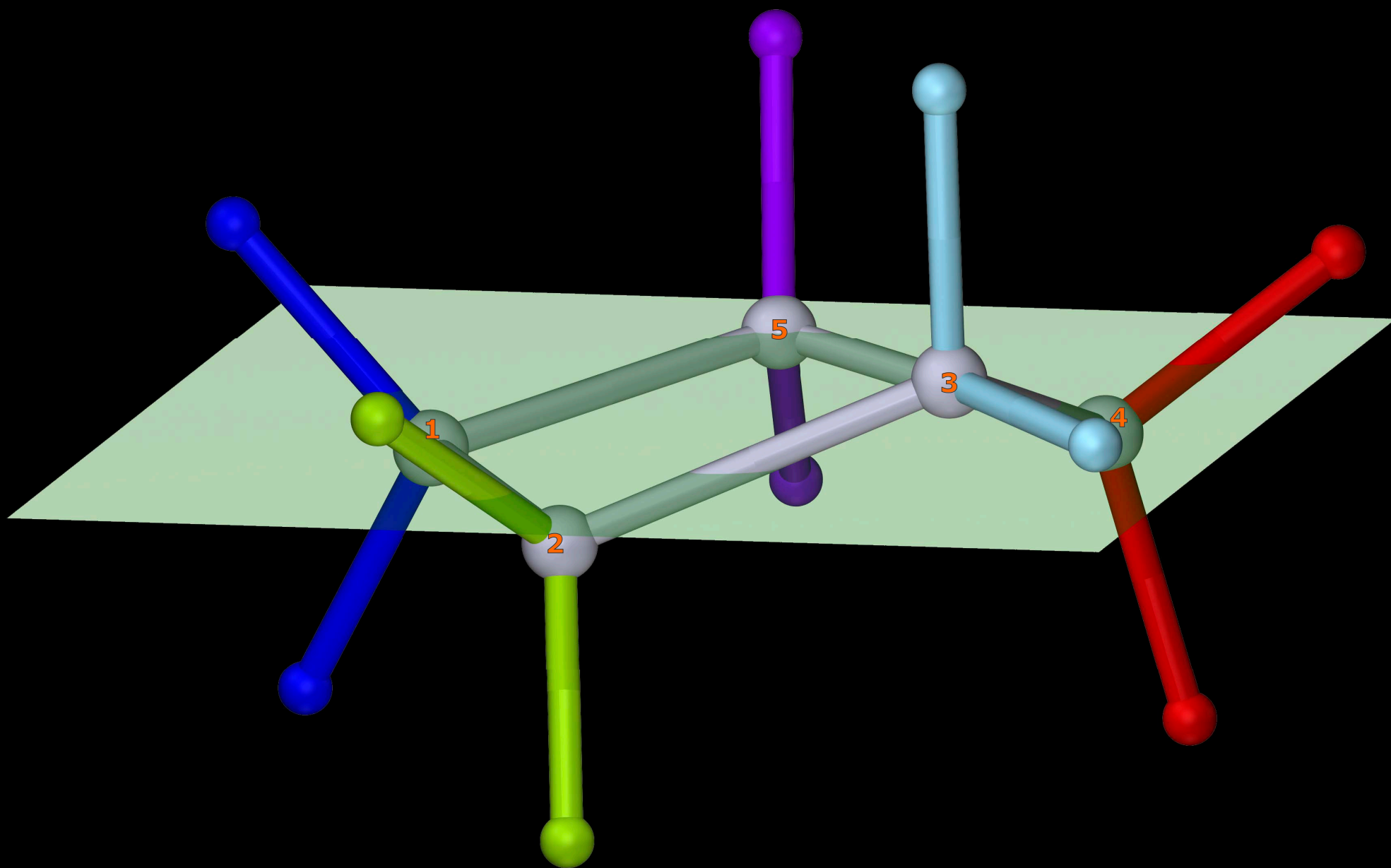
# CIKLOPENTAN - EKVIVALENTNI KONFORMER 1



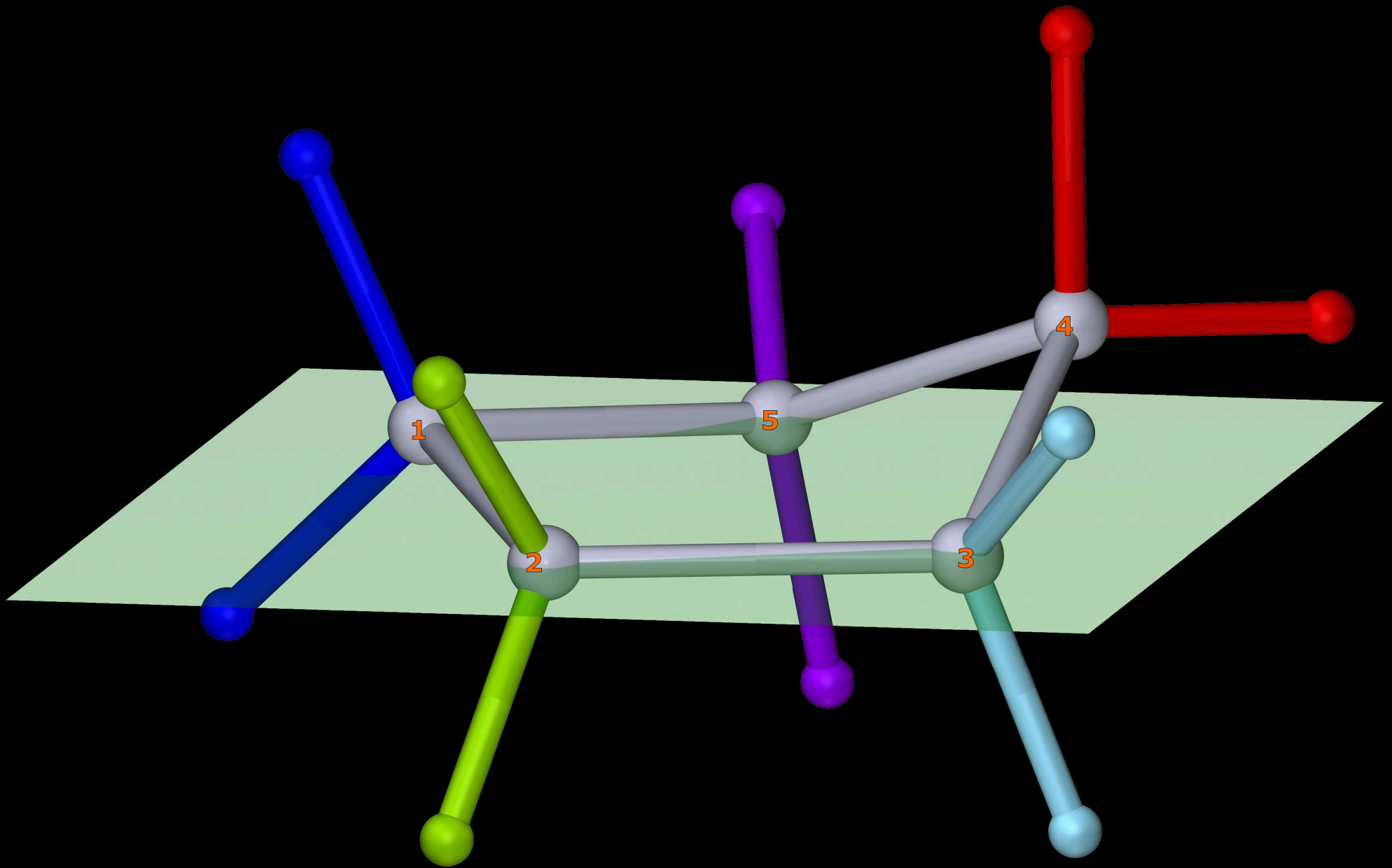
# CIKLOPENTAN - EKVIVALENTNI KONFORMER 2



# CIKLOPENTAN - EKVIVALENTNI KONFORMER 3

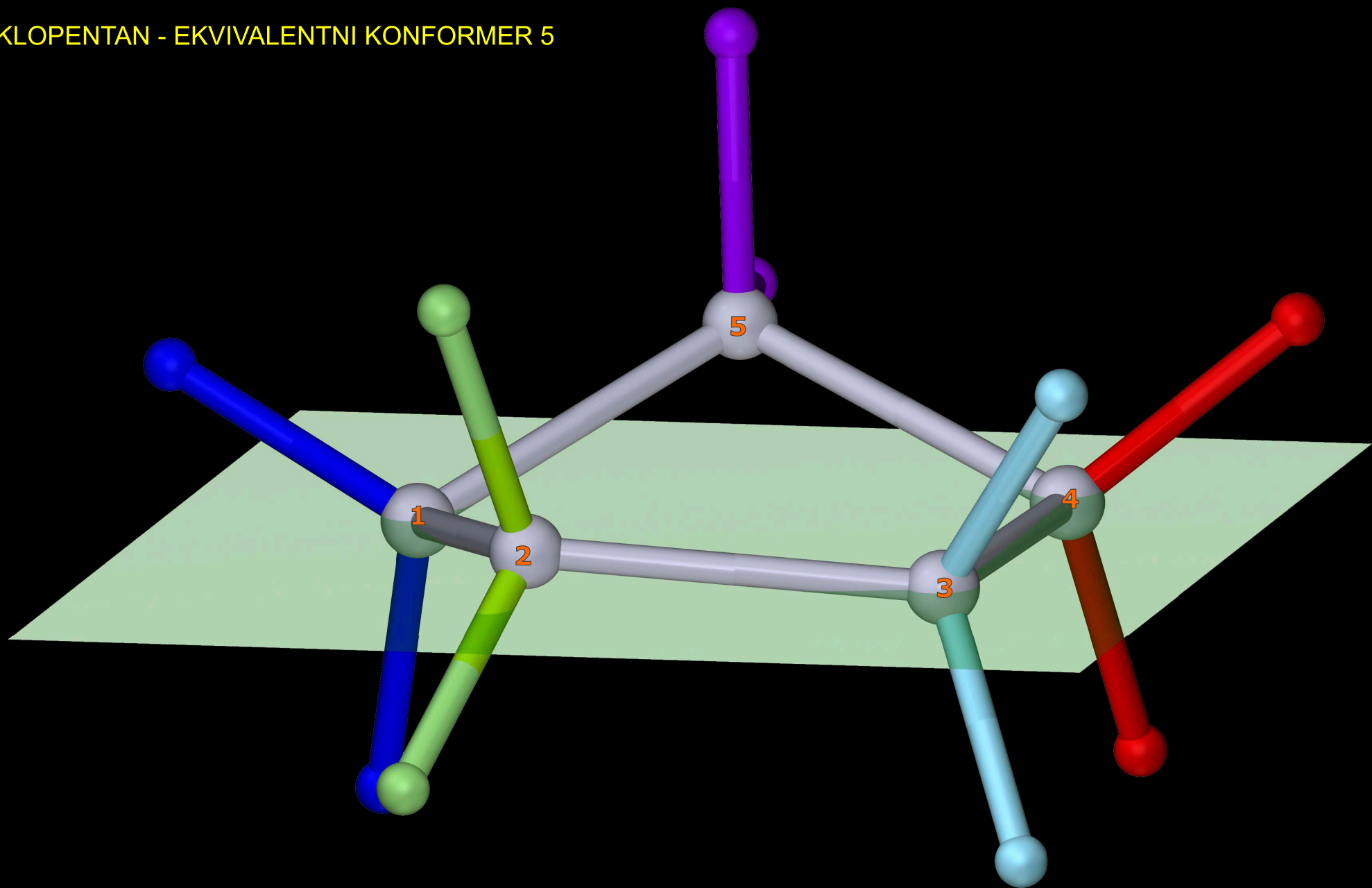


CIKLOPENTAN - EKVIVALENTNI KONFORMER 4





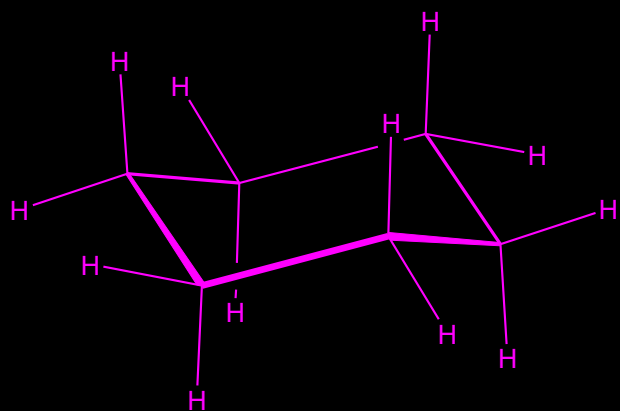
CIKLOPENTAN - EKVIVALENTNI KONFORMER 5



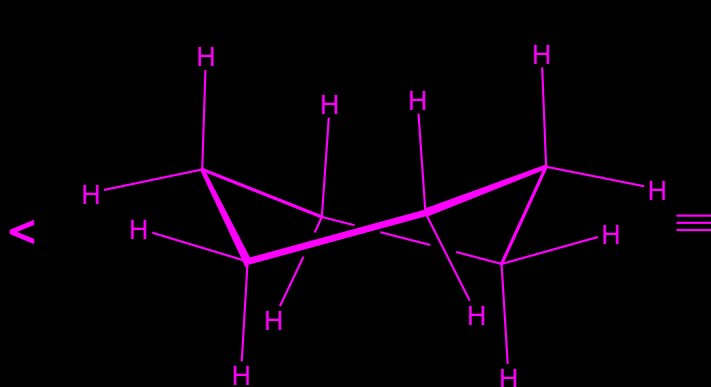
# ZNAČAJNIJE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA I SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA

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

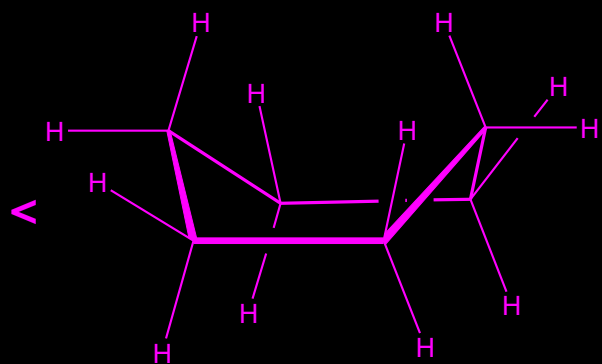
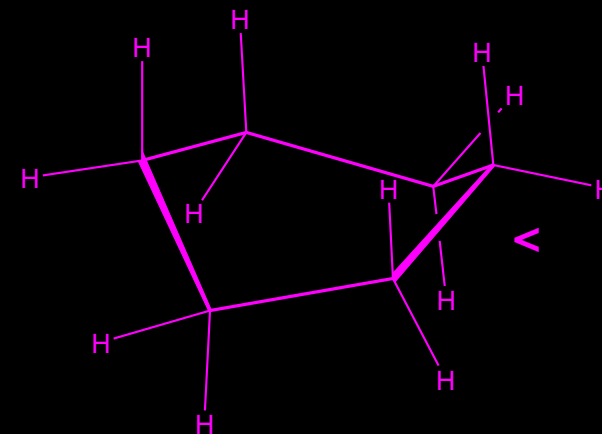
ANALIZU OD ZNAČAJA JE SVEGA NEKOLIKO GRANIČNIH KONFORMACIJA, ČIJE SU STRUKTURE PRIKAZANE. KONFORMACIONA ENERGIJA RASTE U NIZU:



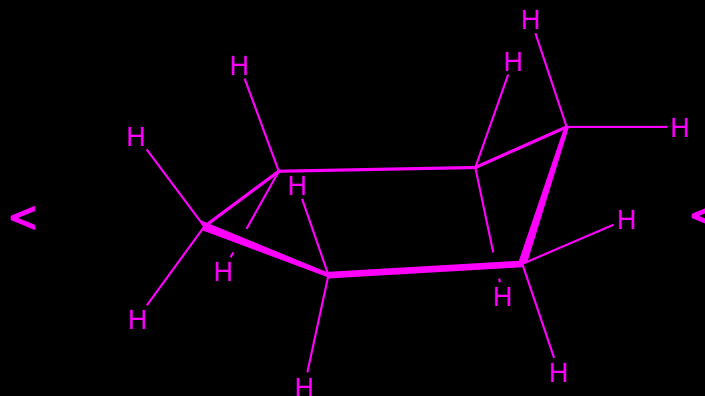
STOLICA 0,0 kcal/mol



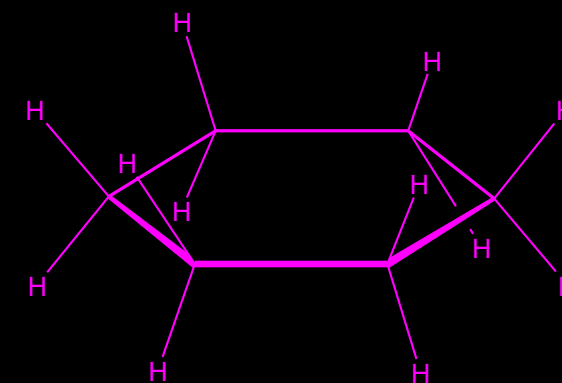
UVIJENA LAĐA 5,5 kcal/mol



LAĐA 6,9 kcal/mol



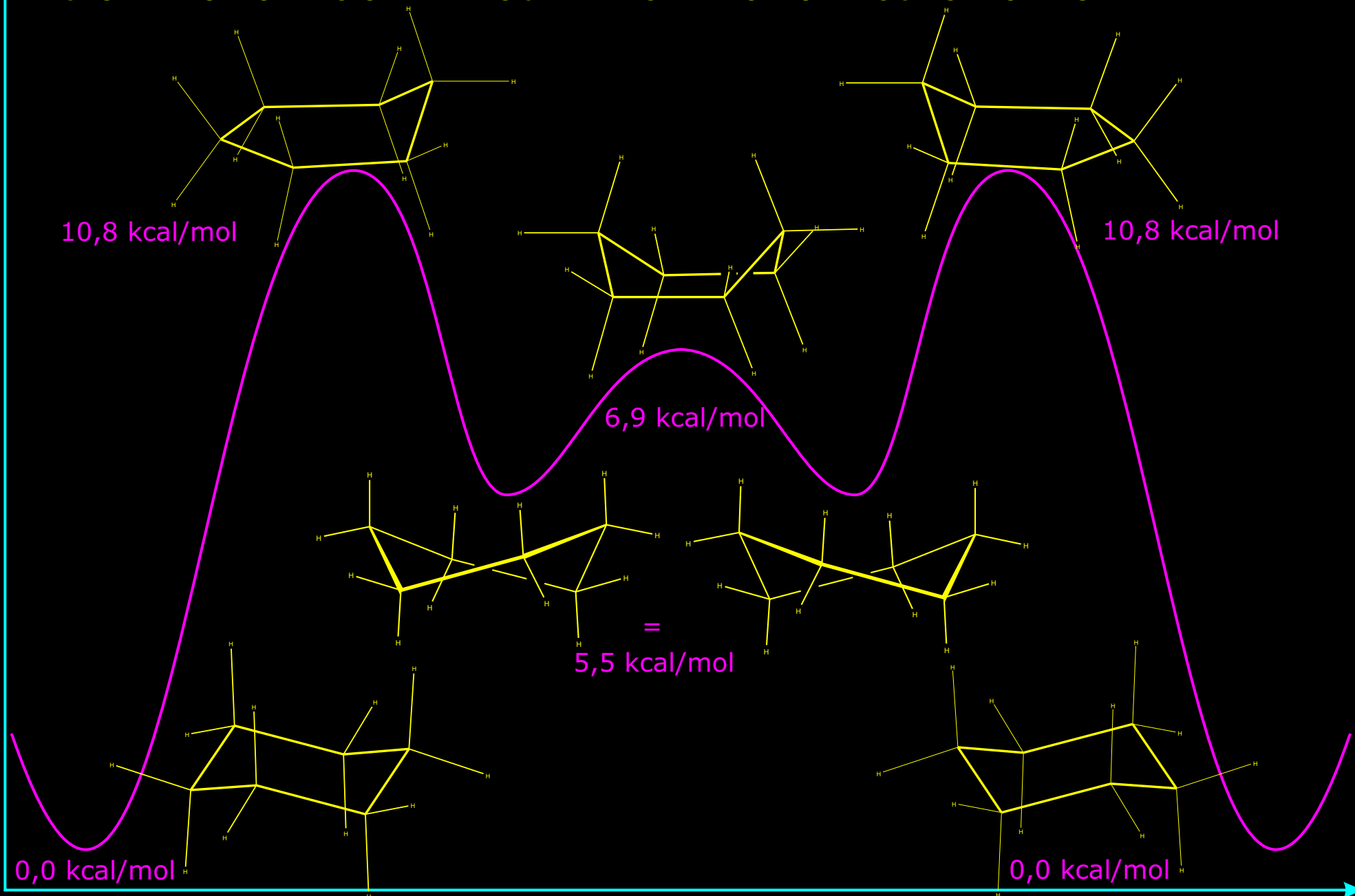
POLUSTOLICA 10,8 kcal/mol



PLANARNA STRUKTURA ? kcal/mol

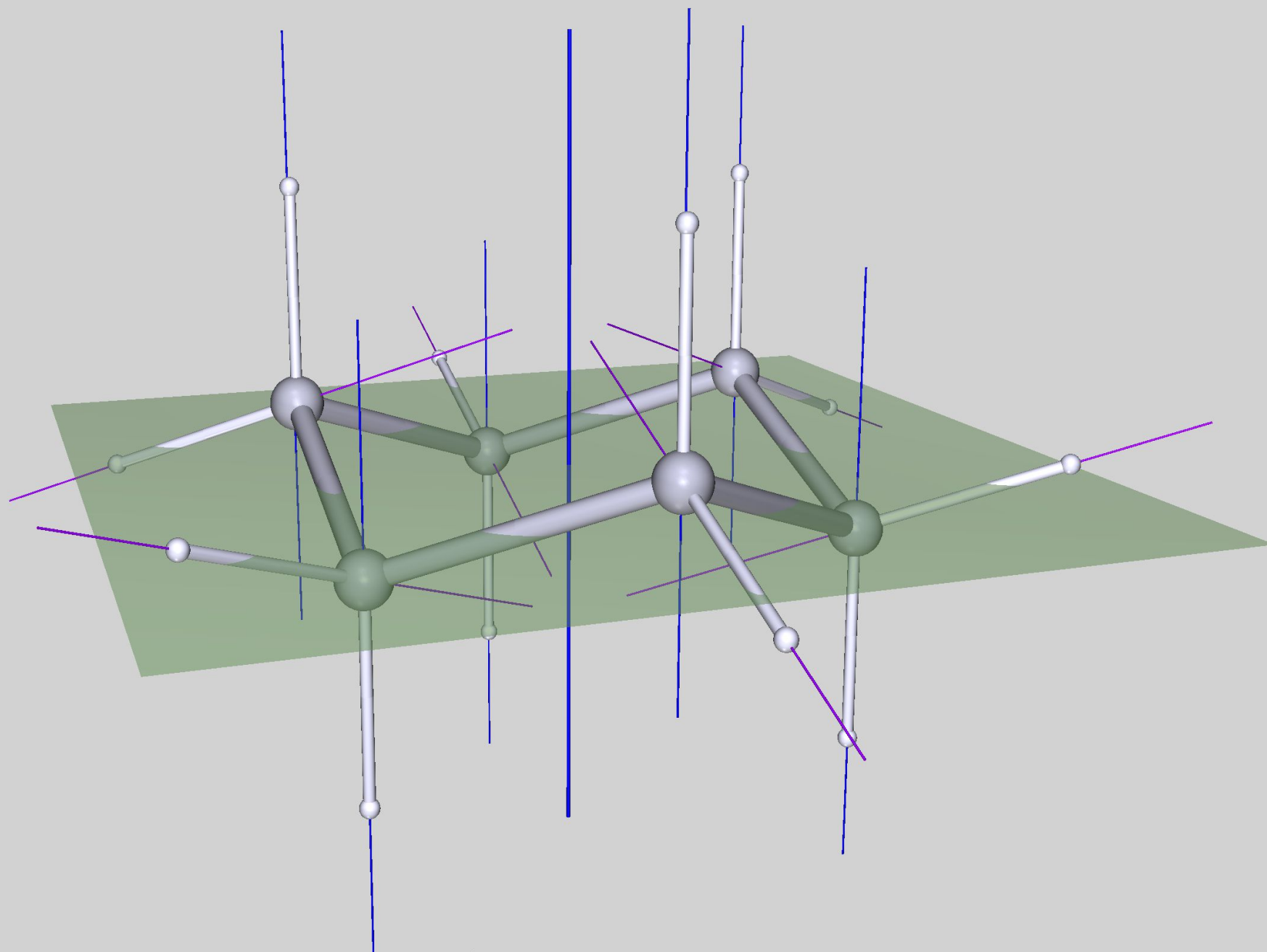
E

# DIJAGRAM KONFORMACIONE ENERGIJE RAZLIČITIH KONFORMACIJA CIKLOHEKSANA

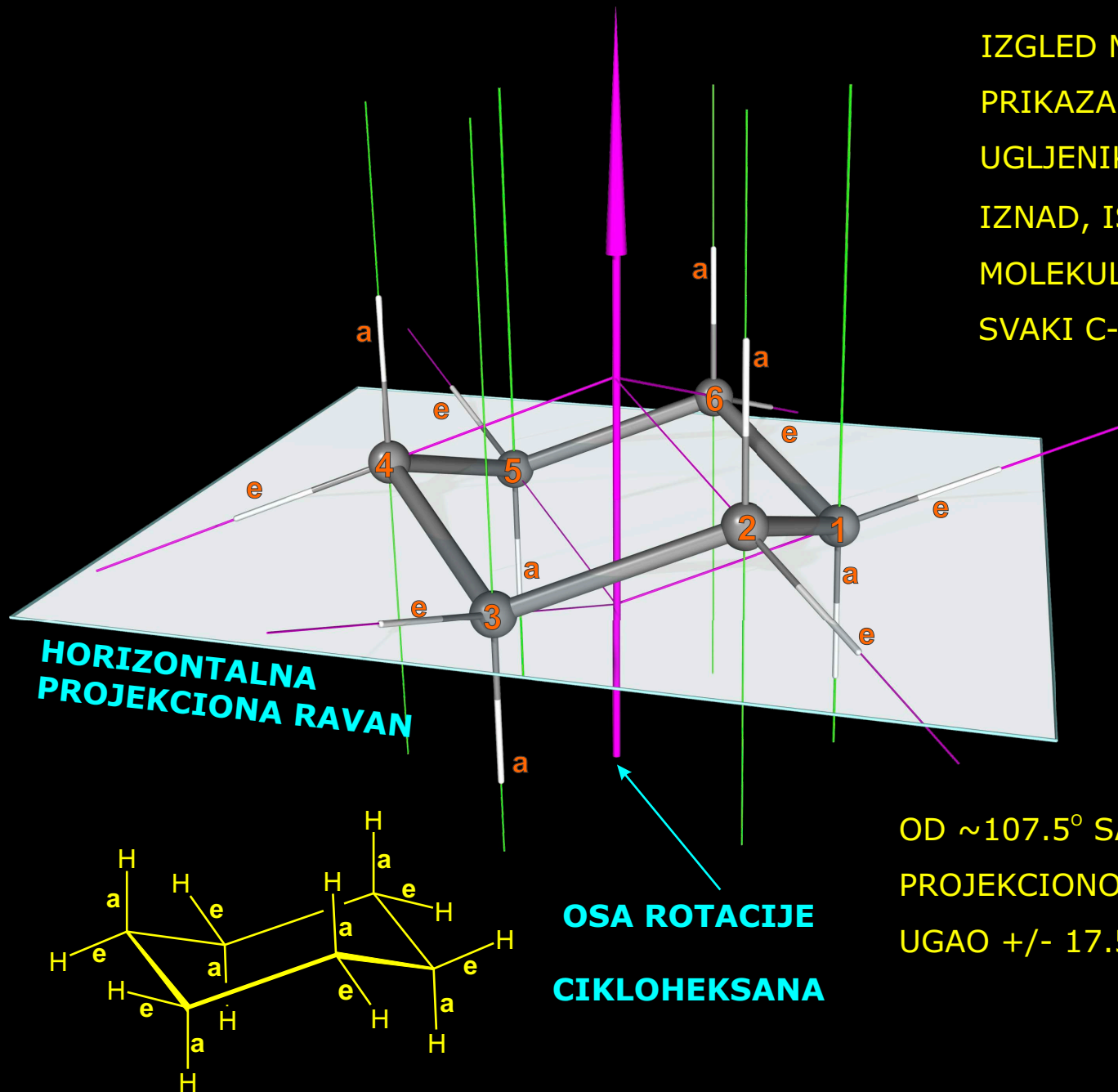


"REAKCIONA KOORDINATA" - VREME NA REAKCIONOJ SKALI ( $\sim 10^{-6}$ s, 20°C)

# GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE - 3D MODEL



## GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE



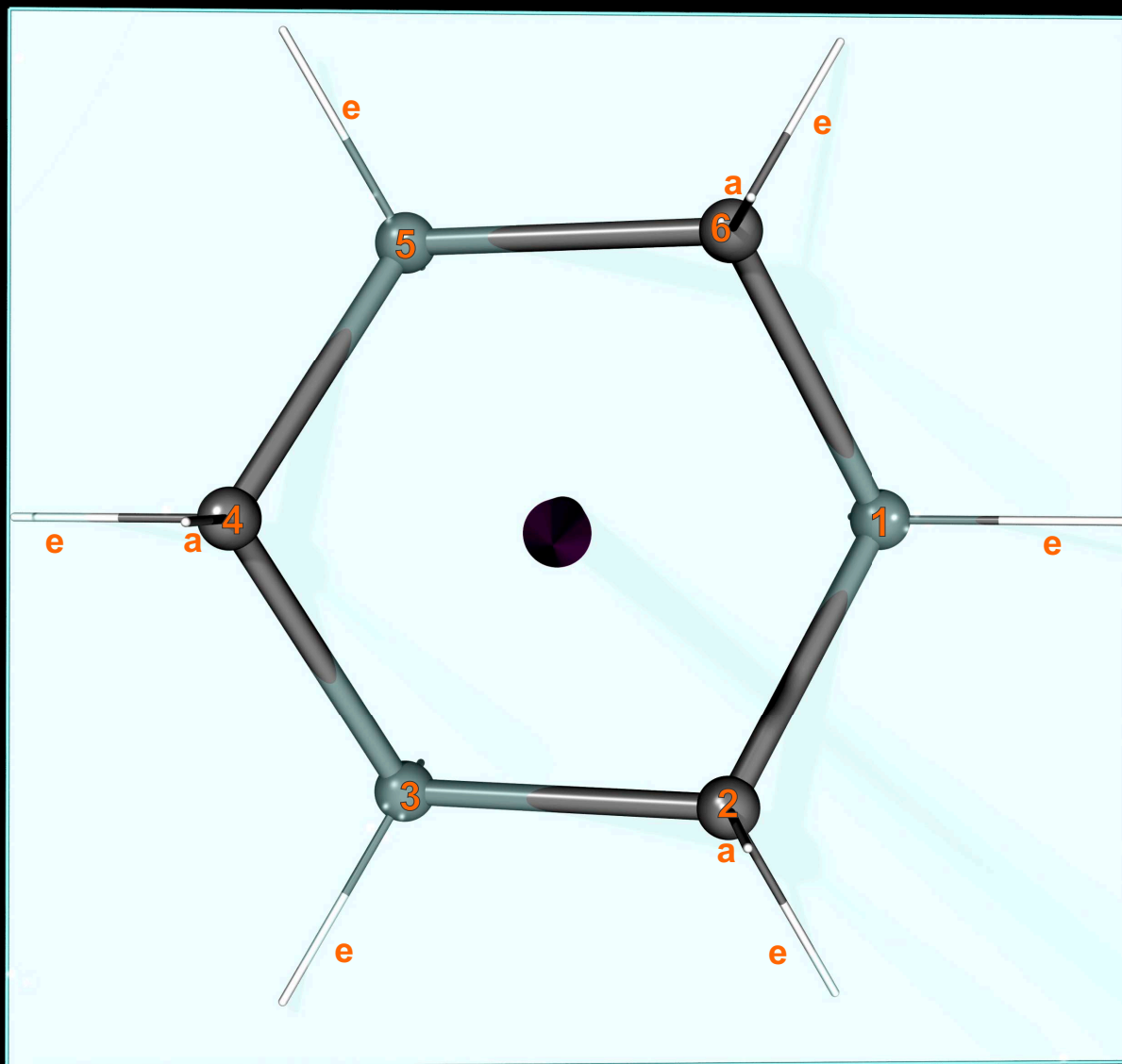
IZGLED MOLEKULA CIKLOHEKSANA PRIKAZAN KAO "FOTOGRAFIJA" 3D MODELA. UGLJENIKOVI ATOMI ( $C_1-C_6$ ) NALAZE SE IZNAD, ISPOD ILI U PROJEKCIJONJ RAVNI MOLEKULA. VODONIKOVI ATOMI, VEZANI ZA SVAKI C-ATOM, MEĐUSOBNO SE RAZLIKUJU

SVOJOM GEOMETRIJOM. ONI OBELEŽENI SA a OZNAČAVAJU SE KAO AKSIJALNI JER SU NORMALNI NA PROJEKCIJONU 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 PROJEKCIJONOM RAVNI ZAKLAPAJU UGAO  $\pm 17.5^\circ$ ).

**OSA ROTACIJE  
CIKLOHEKSANA**

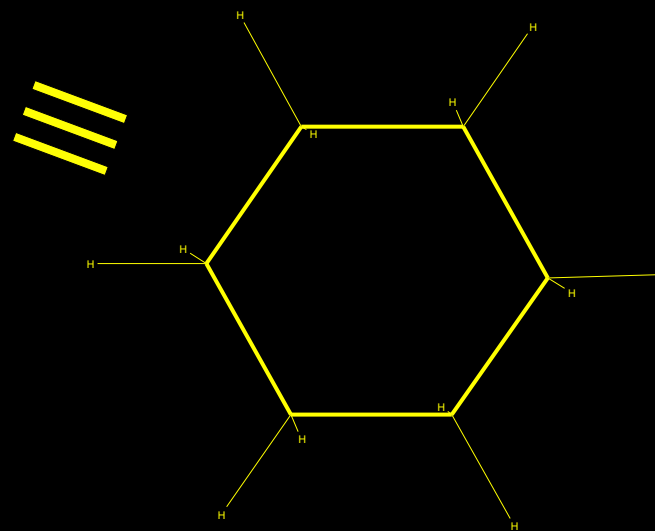
## GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE



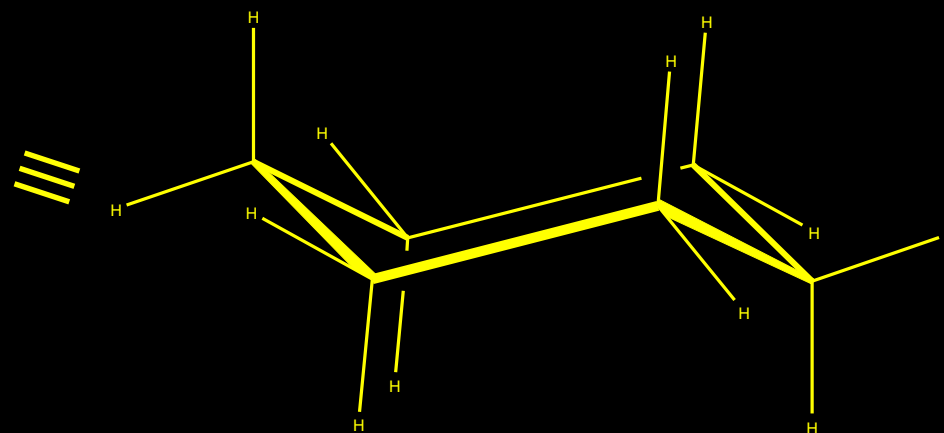
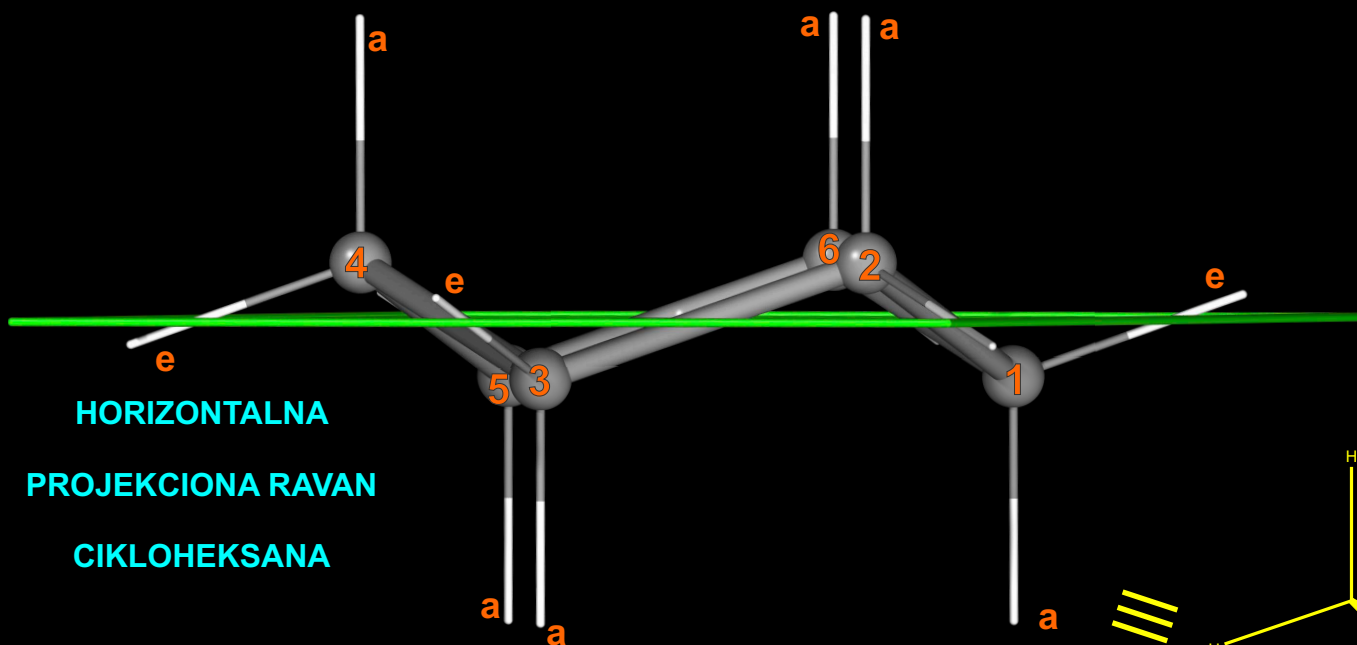
HORIZONTALNA PROJEKCIJA RAVAN CIKLOHEKSANA

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 PROJEKCIJNU RAVAN.  
UGLJENIKOVI ATOMI C1, C3 I C5 NALAZE  
SE ISPOD PROJEKCIJNE RAVNI MOLEKULA  
A C2, C4 I C6 LEŽE IZNAD RAVNI.

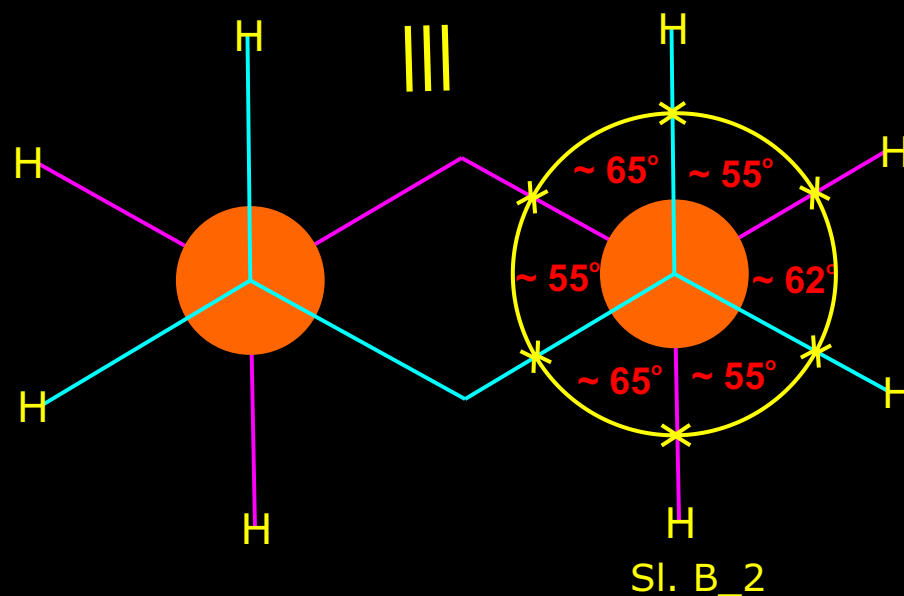
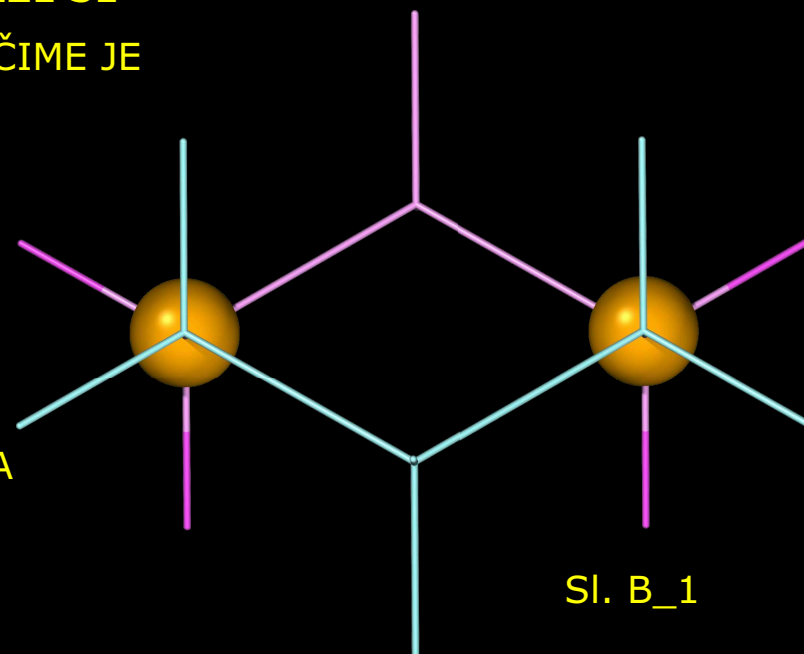
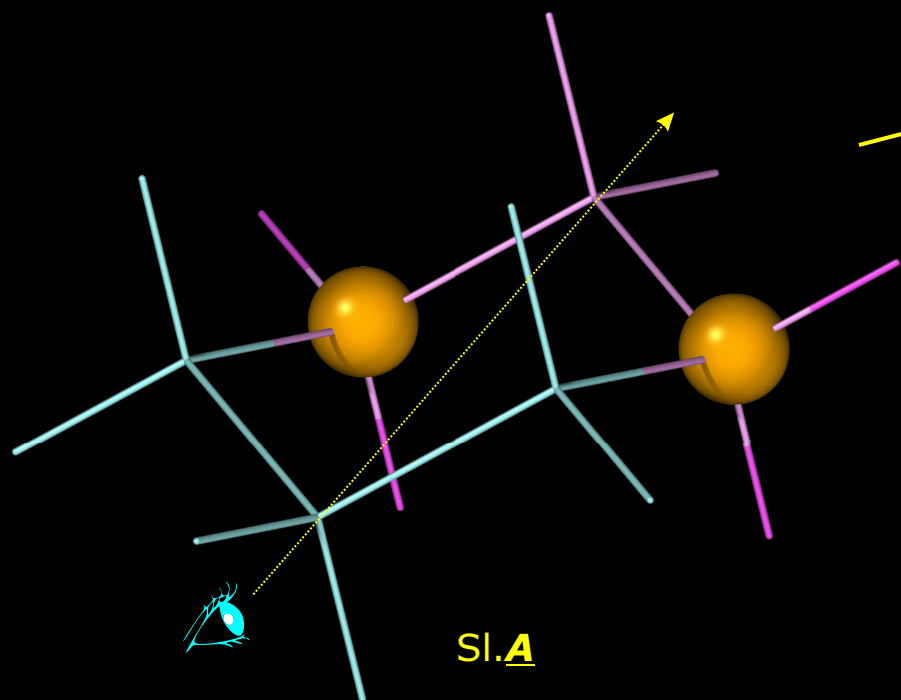
EKVATORIJALNI I AKSIJALNI H ATOMI  
SU OBELEŽENI TAMO GDE SU VIDLJIVI,  
SLOVIMA **e** ODN. **a**.

## GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE

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

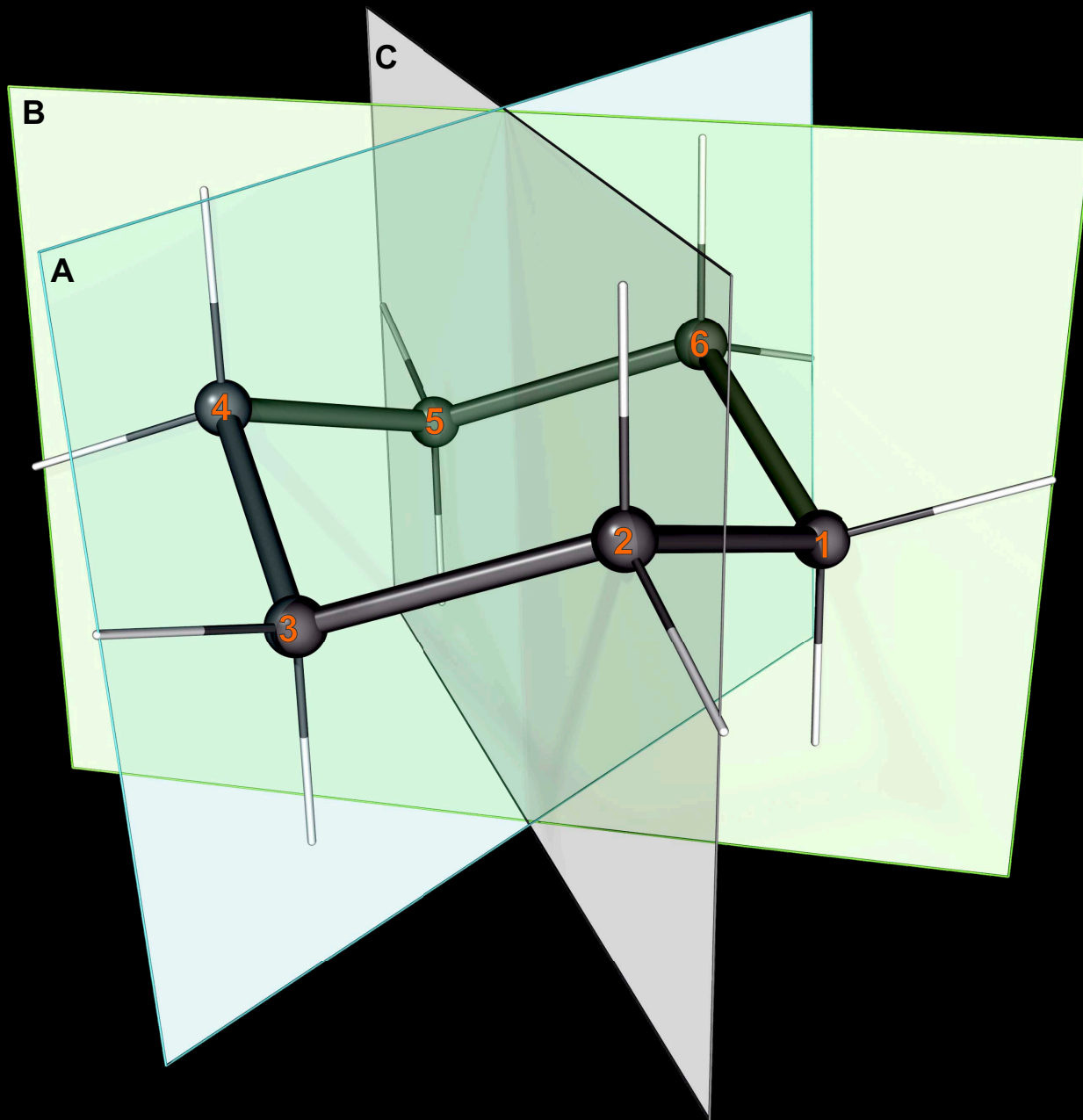
SI. **A** PRIKAZUJE PERSPEKTIVNU PROJEKCIJU CIKLOHEKSANA.

(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



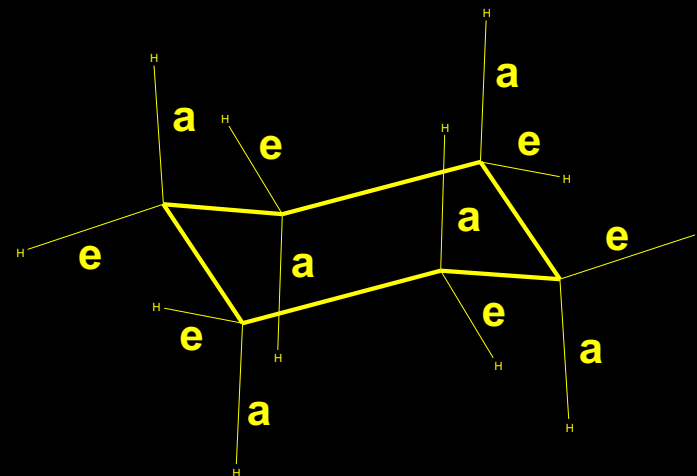


## GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE



CIKLOHEKSAN U KONFORMACIJI STOLICE IMA TRI RAVNI SIMETRIJE KOJE DELE MOLEKUL NA DVA JEDNAKA DELA (KAO PREDMET I LIK U OGLEDALU), SI.A RAVAN SIMETRIJE A PROLAZI KROZ ATOME C1-C4, RAVAN SIMETRIJE B KROZ ATOME C2-C5 A RAVAN SIMETRIJE C KROZ ATOME C3-C6.

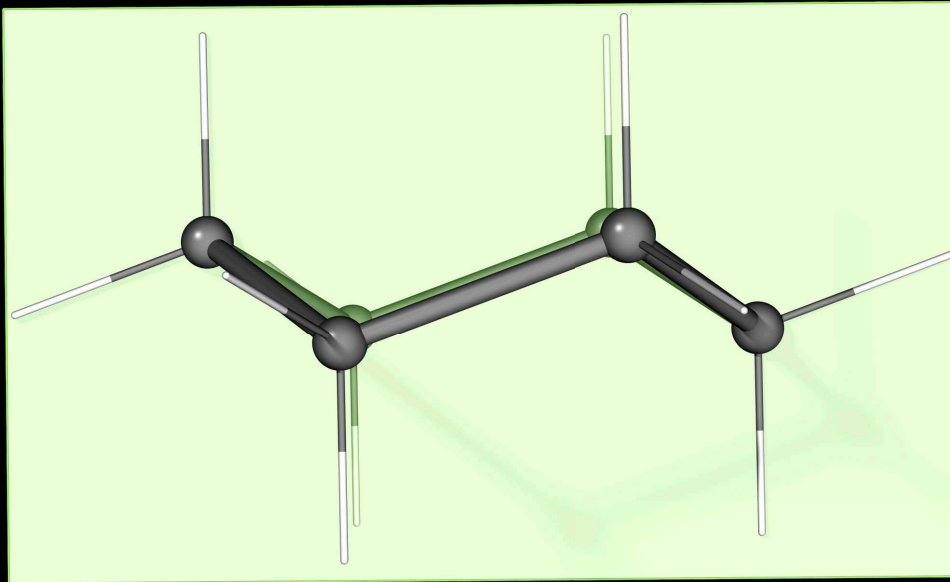
SI.A PRIKAZUJE KONFORMACIONU FORMULU ISTOG MOLEKULA, SA OBELEŽENIM VODONIKOVIM ATOMIMA.



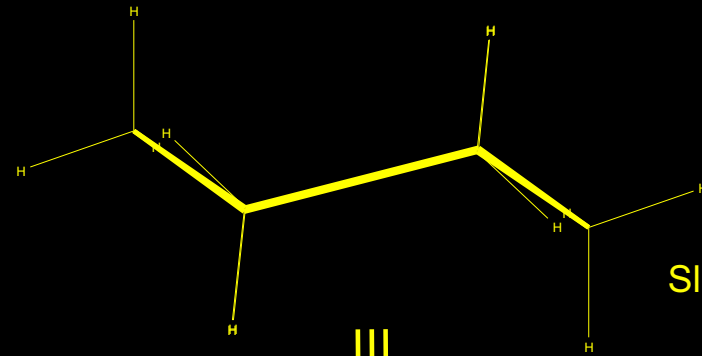
# GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE

SIMETRIJSKE RAVNI CIKLOHEKSANA TAKOĐE SU I VERTIKALNE PROJEKCIONE RAVNI (SI.A\_1).

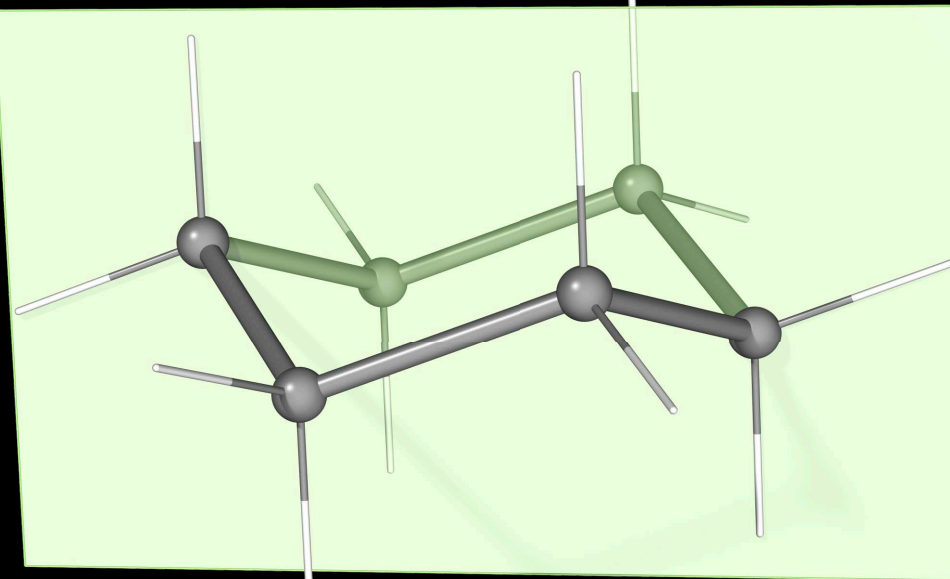
KOSA PROJEKCIJA 3D MODELA CIKLOHEKSANA (SI. B\_2) KORISTI SE ZA STANDARDNU KONFORMACIONU FORMULU CIKLOHEKSANA.



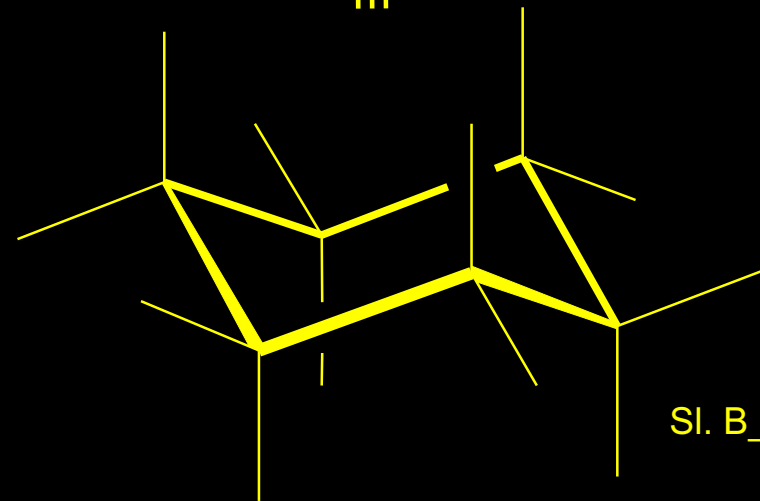
SI.A\_1



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  $120^\circ$  DOBIJA SE STRUKTURA II KOJA IMA IDENTIČNU

GEOMETRIJU KAO I STRUKTURA

I. ROTACIJOM STRUKTURE II

ZA DALJIH  $120^\circ$  POSTAJE

STRUKTURA III, TAKOĐE

IDENTIČNE GEOMETRIKE

KAO I I II. ROTACIJOM ZA

JOŠ  $120^\circ$  ZATVARA SE PUN

KRUG.

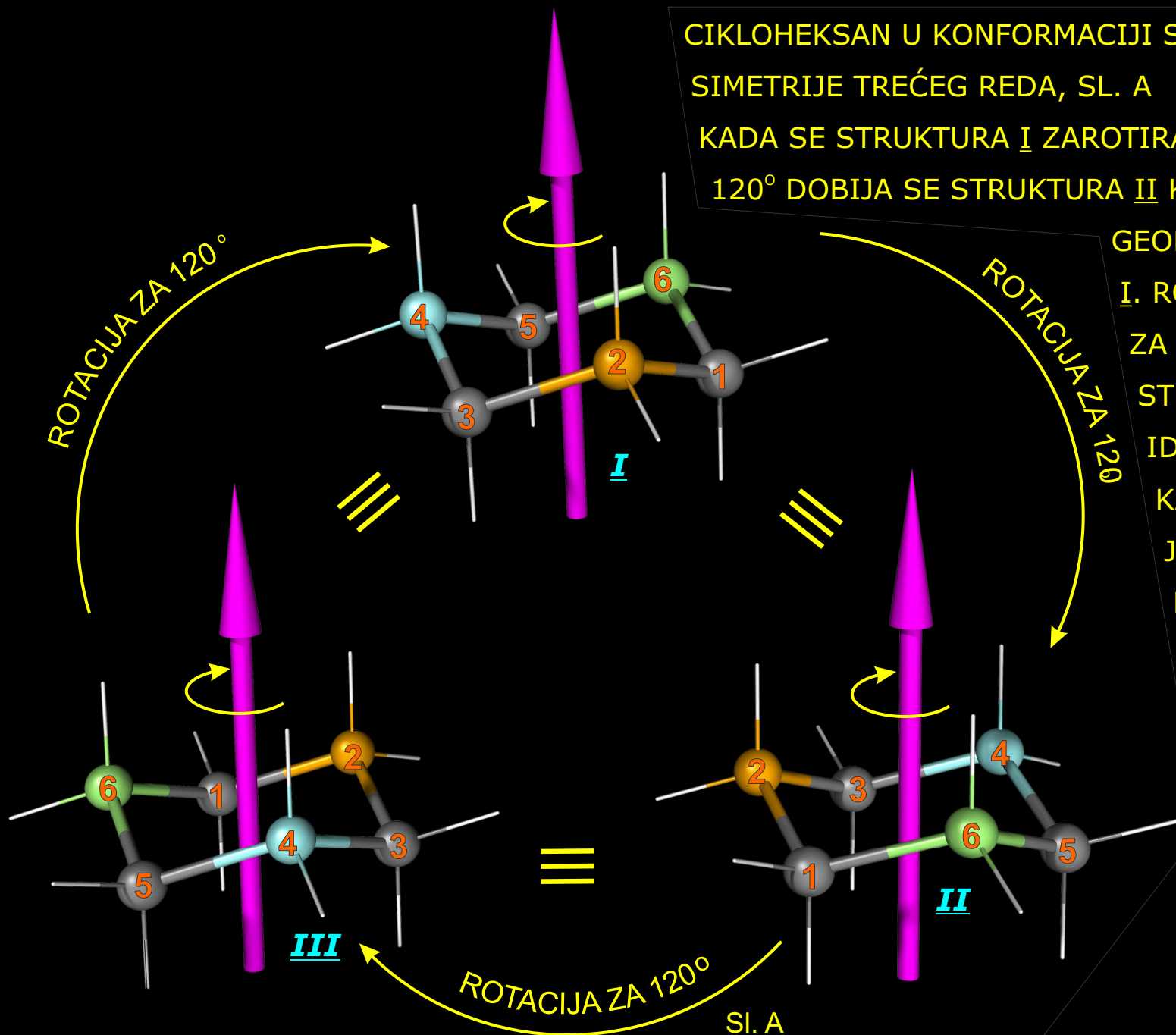
(UGLJENIKOVI ATOMI 2,4 I

6 OBELEŽENI SU

RAZLIČITIM BOJAMA

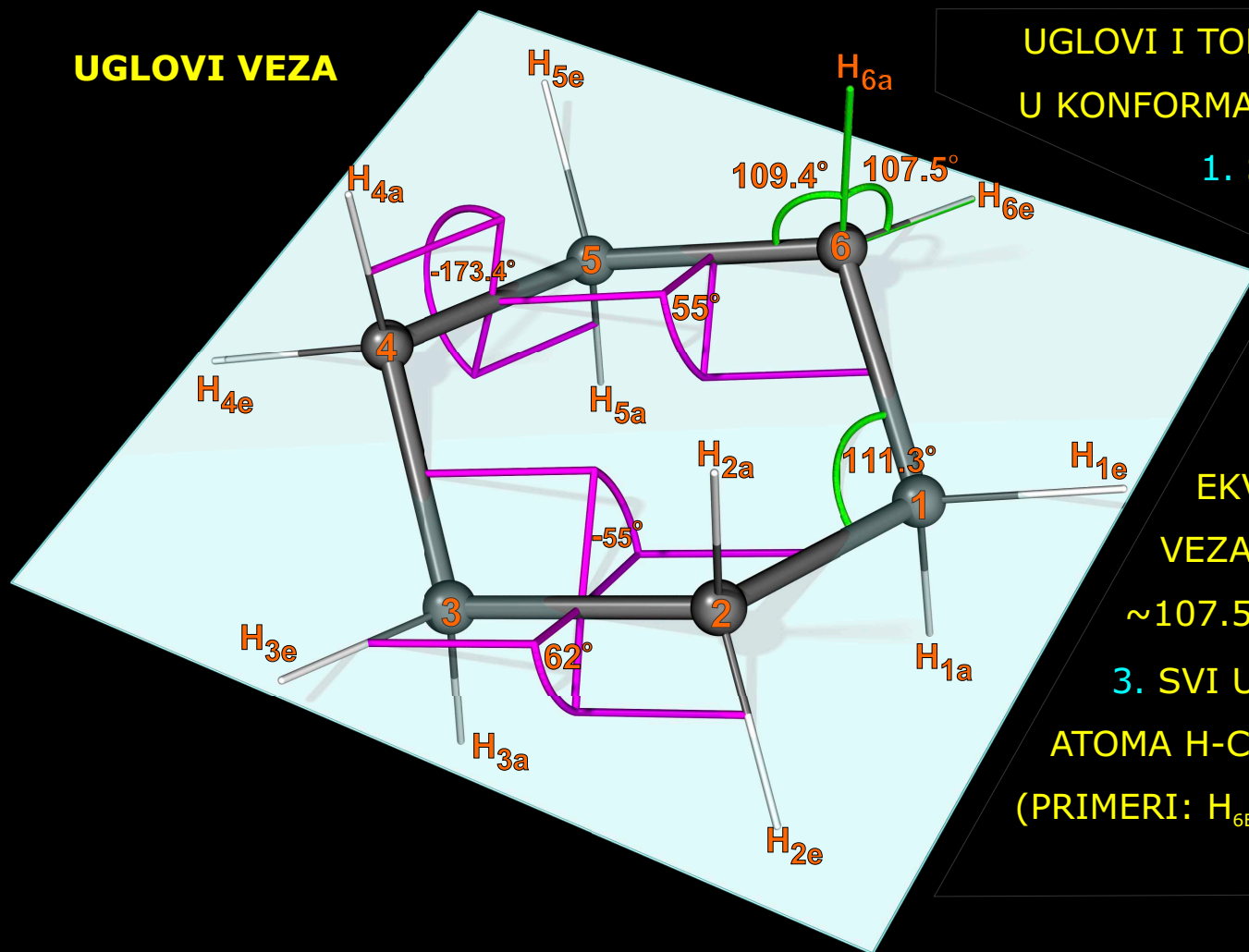
ISKLUČIVO RADI

RAZLIKOVANJA).



# 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:  $H_{1A}-C_1-H_{1E}$ ).

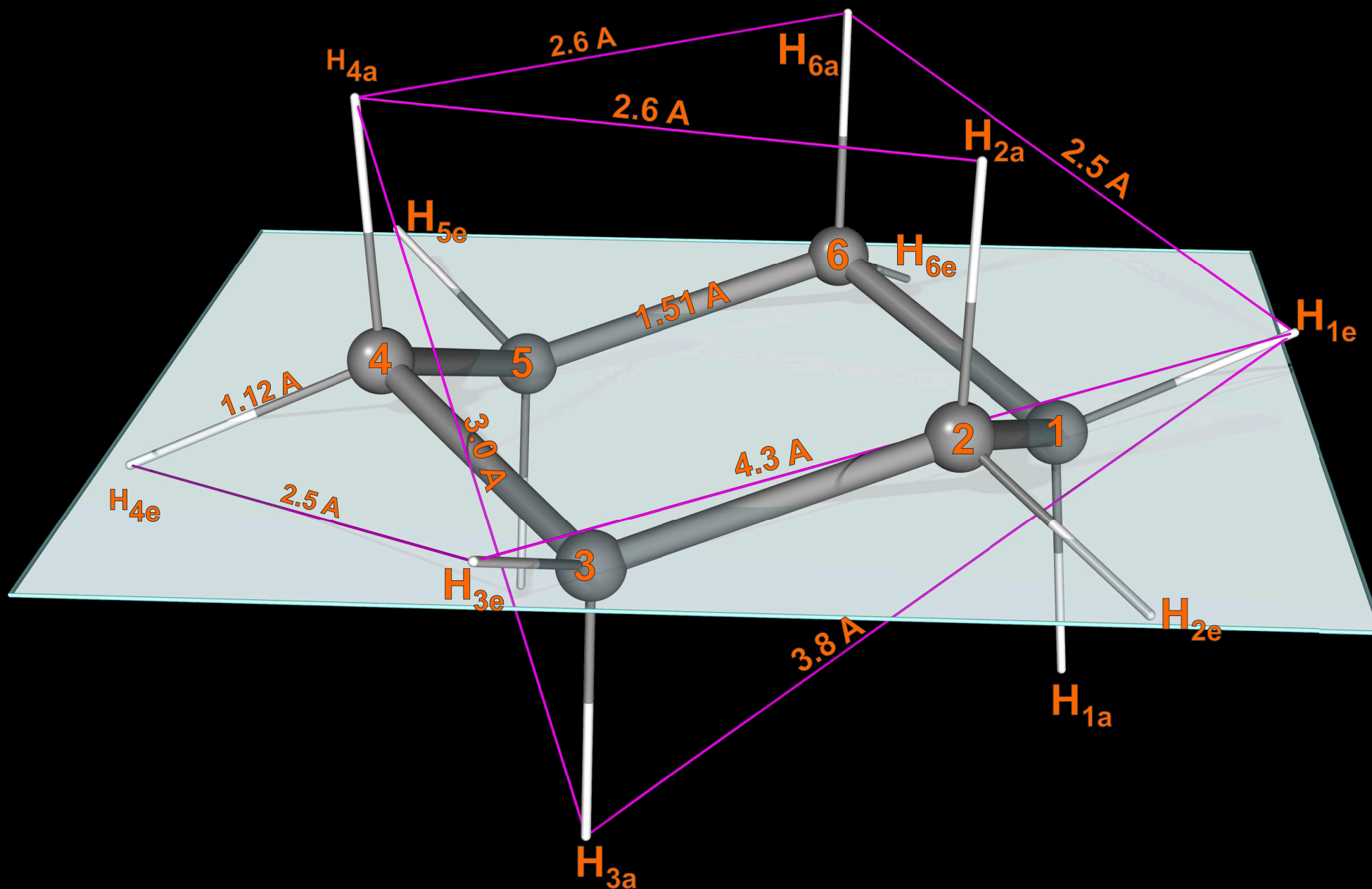
3. SVI UGLOVI KOJE ZAKLAPAJU 3 SUSEDNA ATOMA H-C-C SU  $\sim 109.5^\circ$ . (PRIMERI:  $H_{6E}-C_6-C_1$ ,  $H_{6A}-C_6-C_1$ ).

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

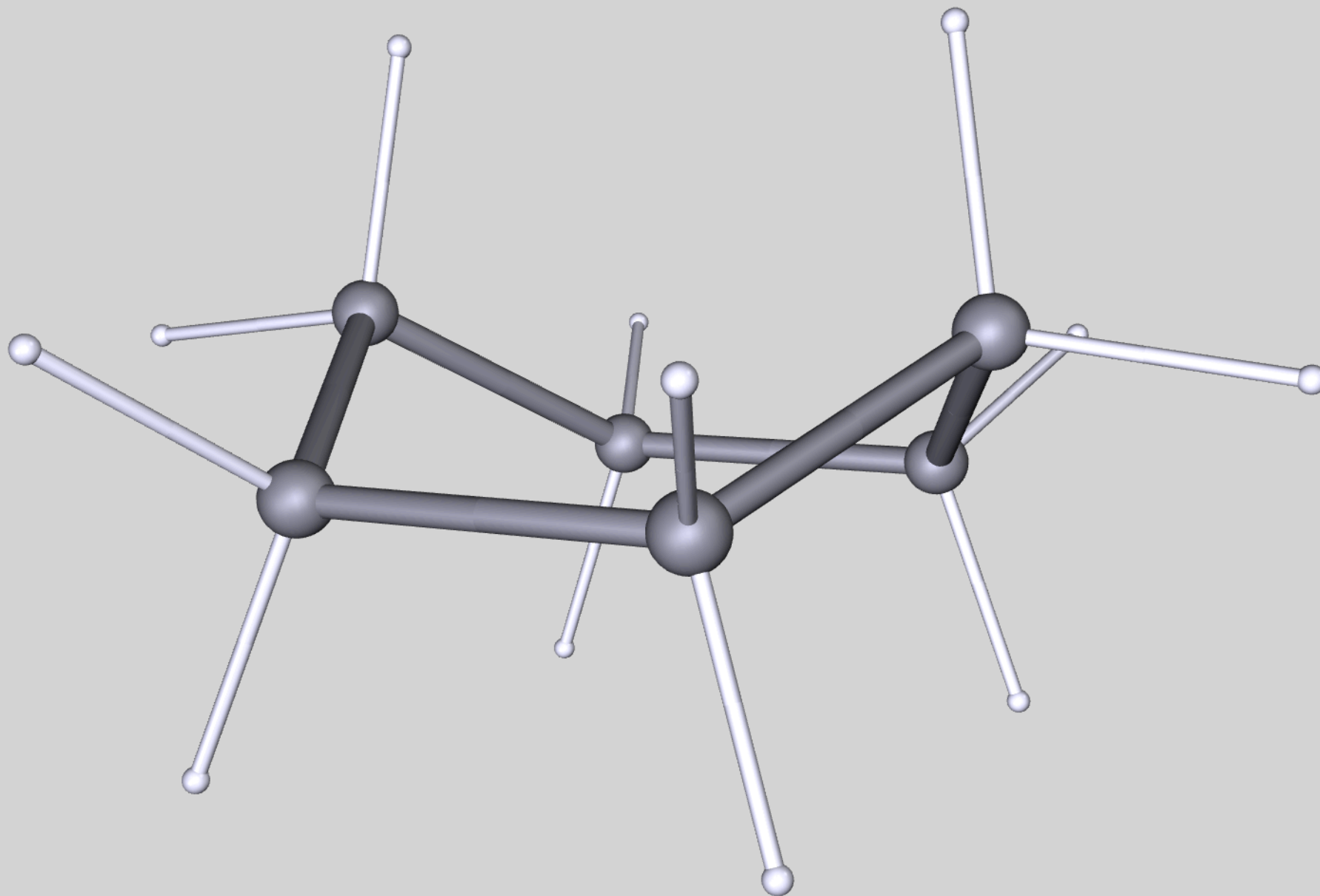
6. SVI TORZIONI UGLOVI KOJE ZAKLAPAJU 4 SUSEDNA ATOMA I TO:  $H_A-C-C-H_E$  IMAJU ISTU VREDNOST ( $\sim \pm 55^\circ$ ). (PRIMER:  $H_{3A}-C_3-C_4-H_{4E} = \sim -55^\circ$ ).

GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI STOLICE - SAMO INFORMATIVNO

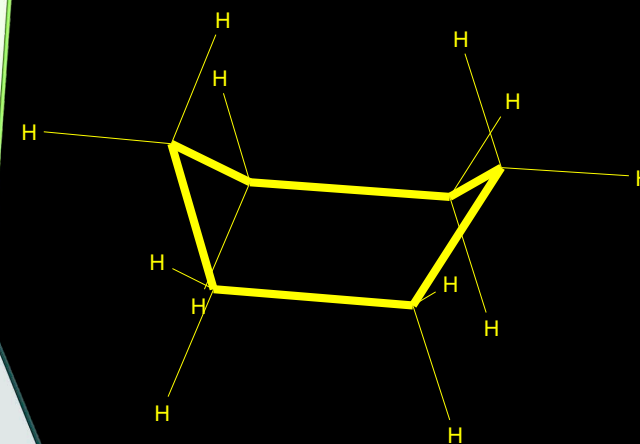
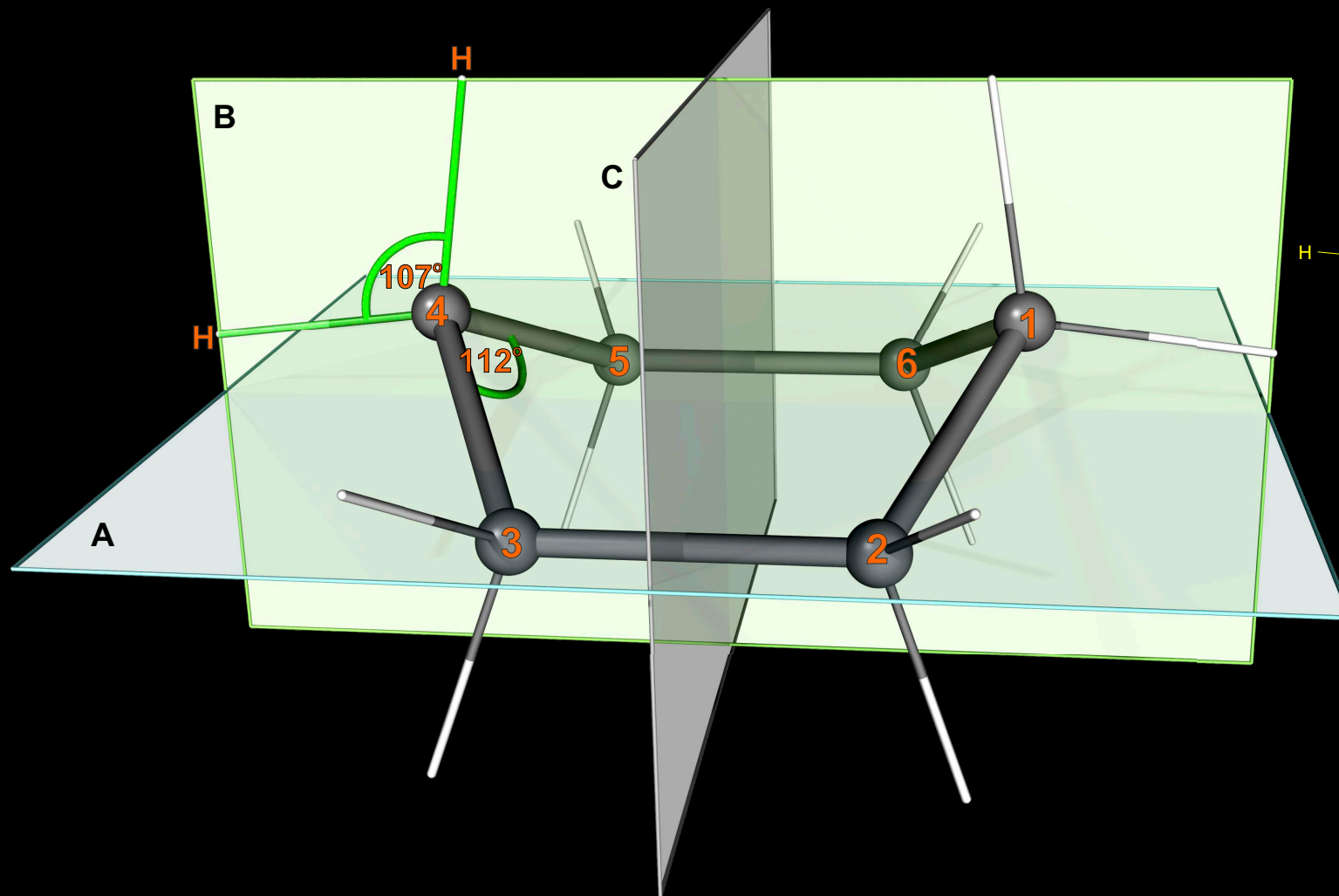
DUŽINE C-C i C-H VEZA KAO I RASTOJANJA IZMEĐU POJEDINIH H - ATOMA:



# GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI LAĐE -3D MODEL



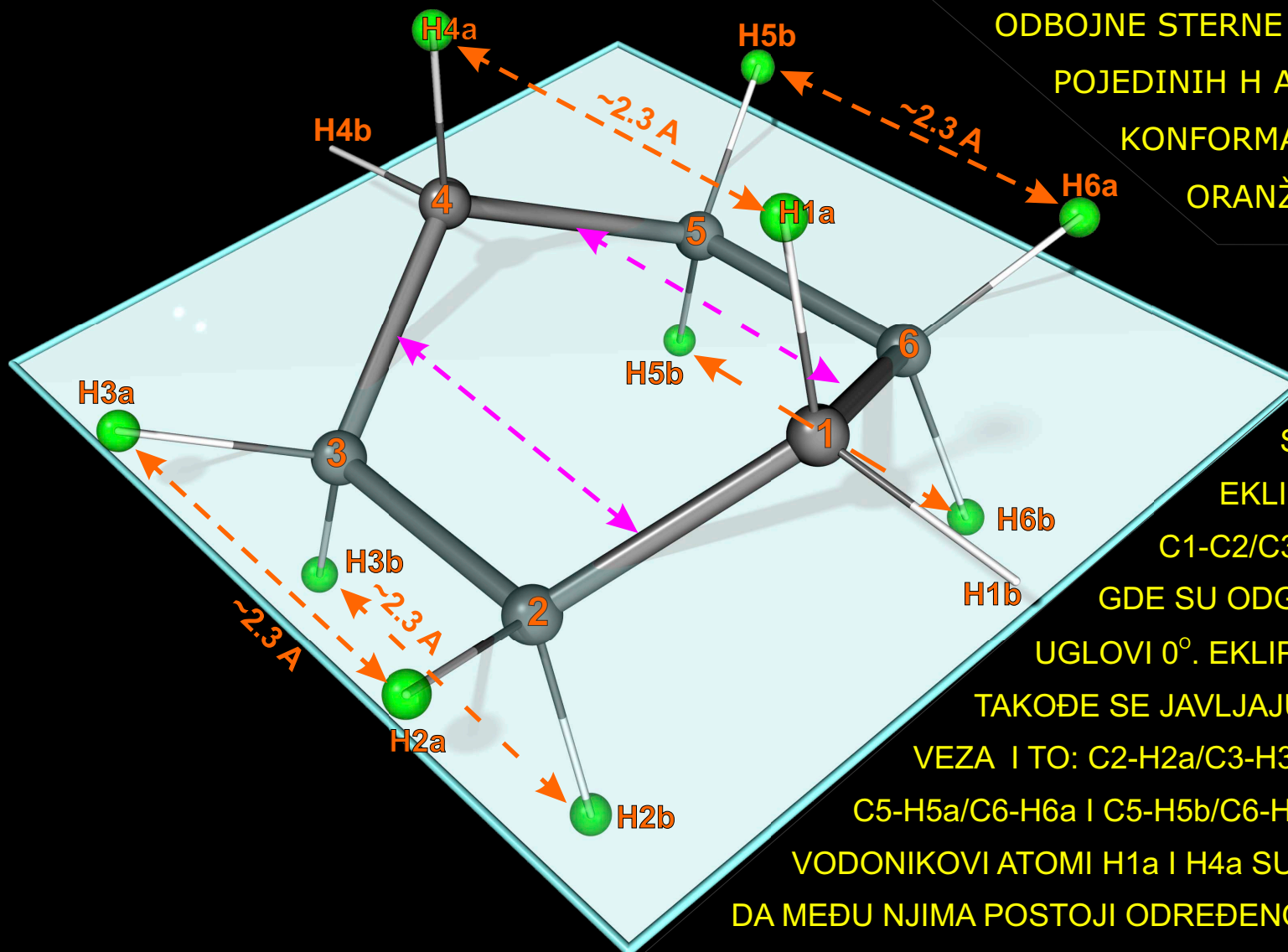
## GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI LAĐE



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)

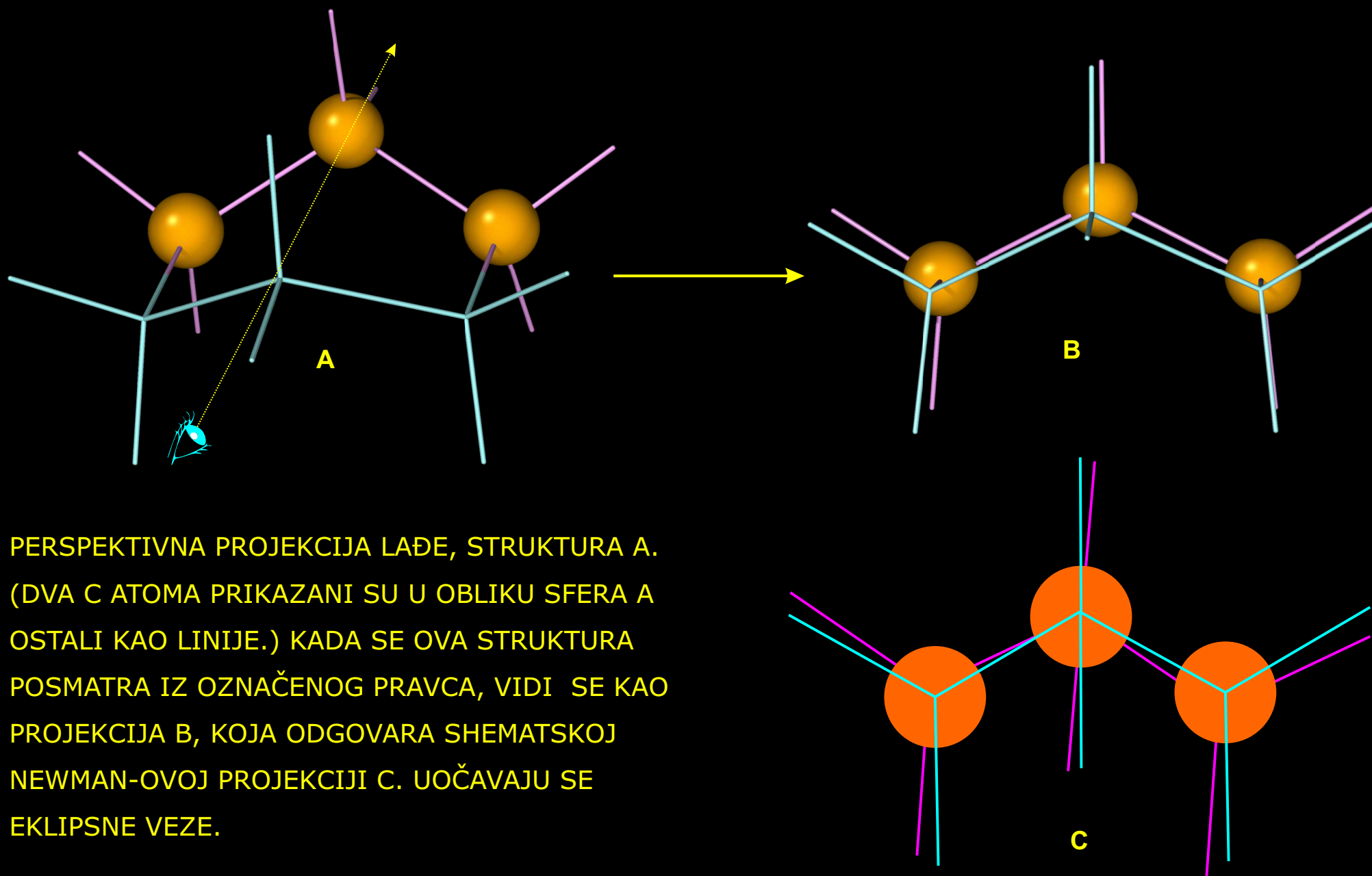


ODBOJNE STERNE INTERAKCIJE IZMEĐU POJEDINIHX H ATOMA (ZELENE SFERE) U KONFORMACIJI LAĐE OZNAČENE SU ORANŽ LINIJAMA.

KONFORMACIJA LAĐE IMA ZNAČAJAN STERNI NAPON USLED EKLIPSNIHX KONFORMACIJA VEZA C1-C2/C3-C4 I C4-C5/C6-C1 (TJ. TAMO GDE SU ODGOVARAJUĆI TORZIONI UGLOVI  $0^\circ$ ). EKLIPSNE KONFORMACIJE TAKOĐE SE JAVLJAJU I KOD POJEDINIHX 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.

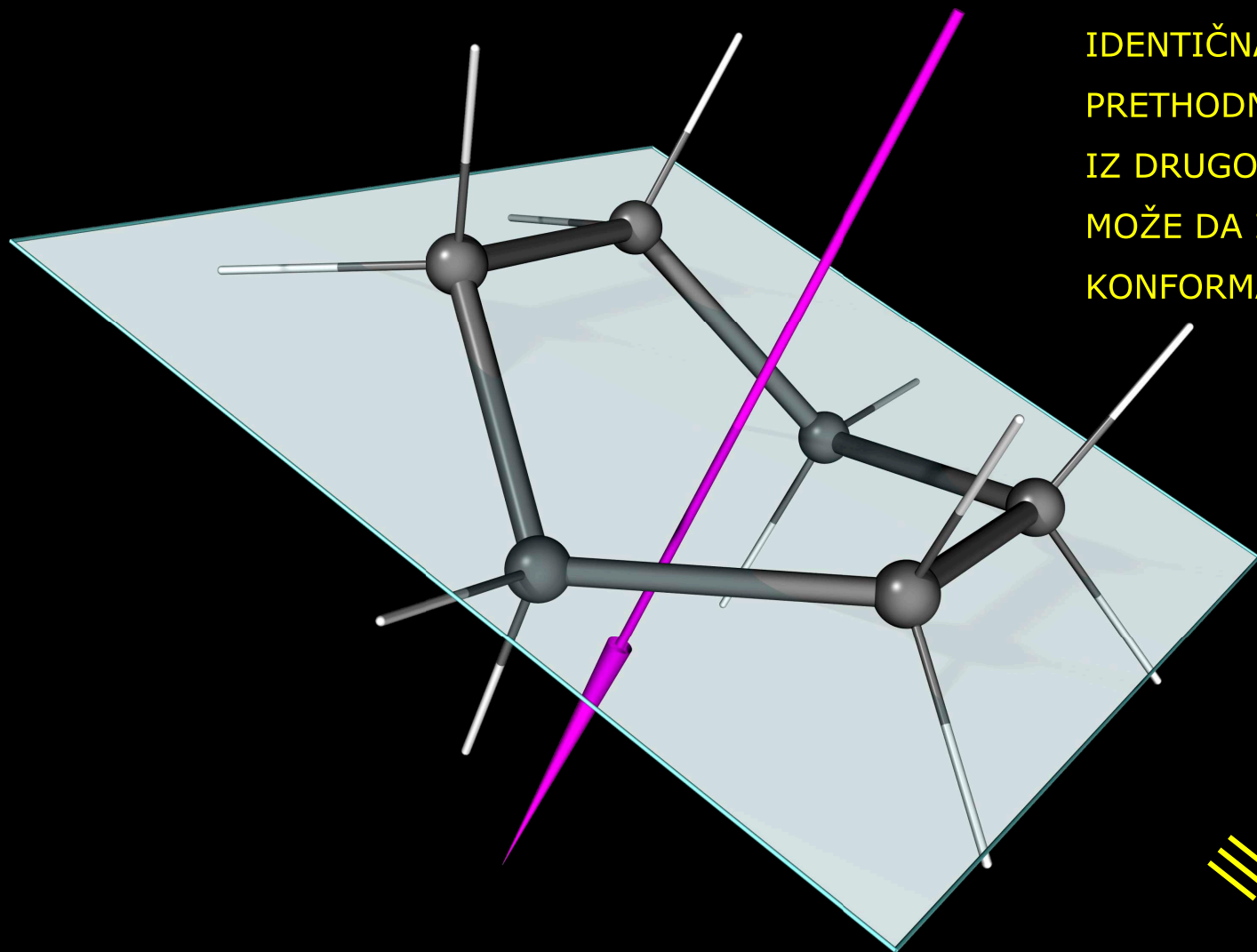


## DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - KONFORMACIJA LAĐE (nastavak)

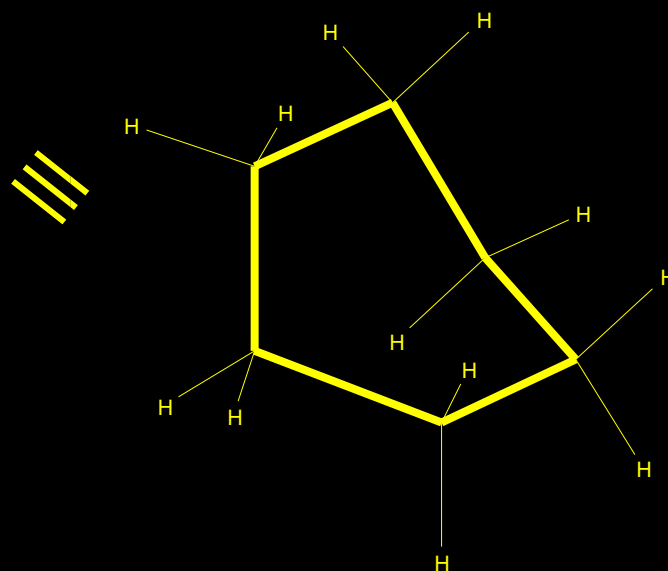


PERSPEKTIVNA PROJEKCIJA LAĐE, STRUKTURA A.  
(DVA C ATOMA PRIKAZANI SU U OBLIKU SFERA A  
OSTALI KAO LINIJE.) KADA SE OVA STRUKTURA  
POSMATRA IZ OZNAČENOG PRAVCA, VIDI SE KAO  
PROJEKCIJA B, KOJA ODGOVARA SHEMATSKOJ  
NEWMAN-OVOJ PROJEKCIJI C. UOČAVAJU SE  
EKLIPSNE VEZE.

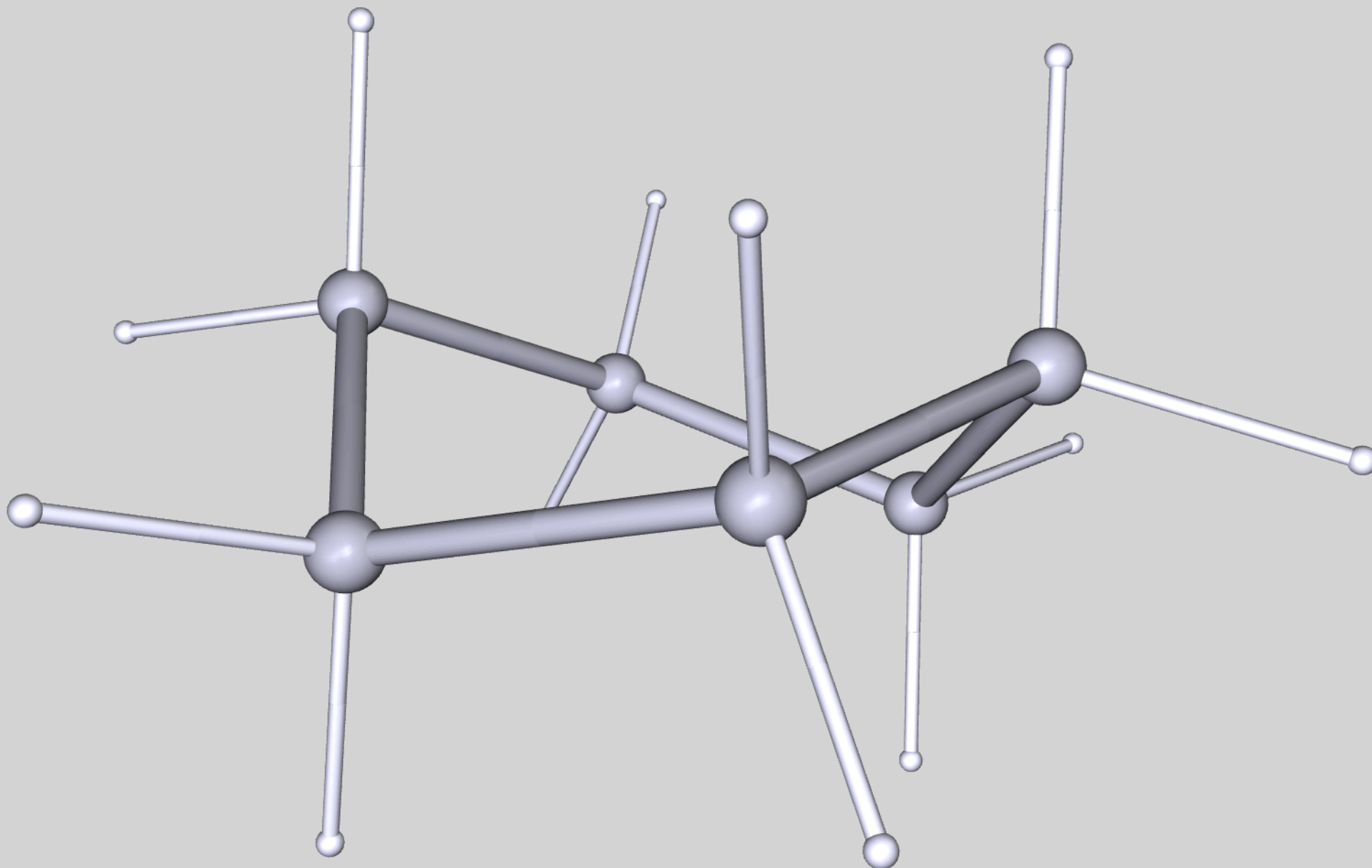
## DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - KONFORMACIJA LAĐE (nastavak)



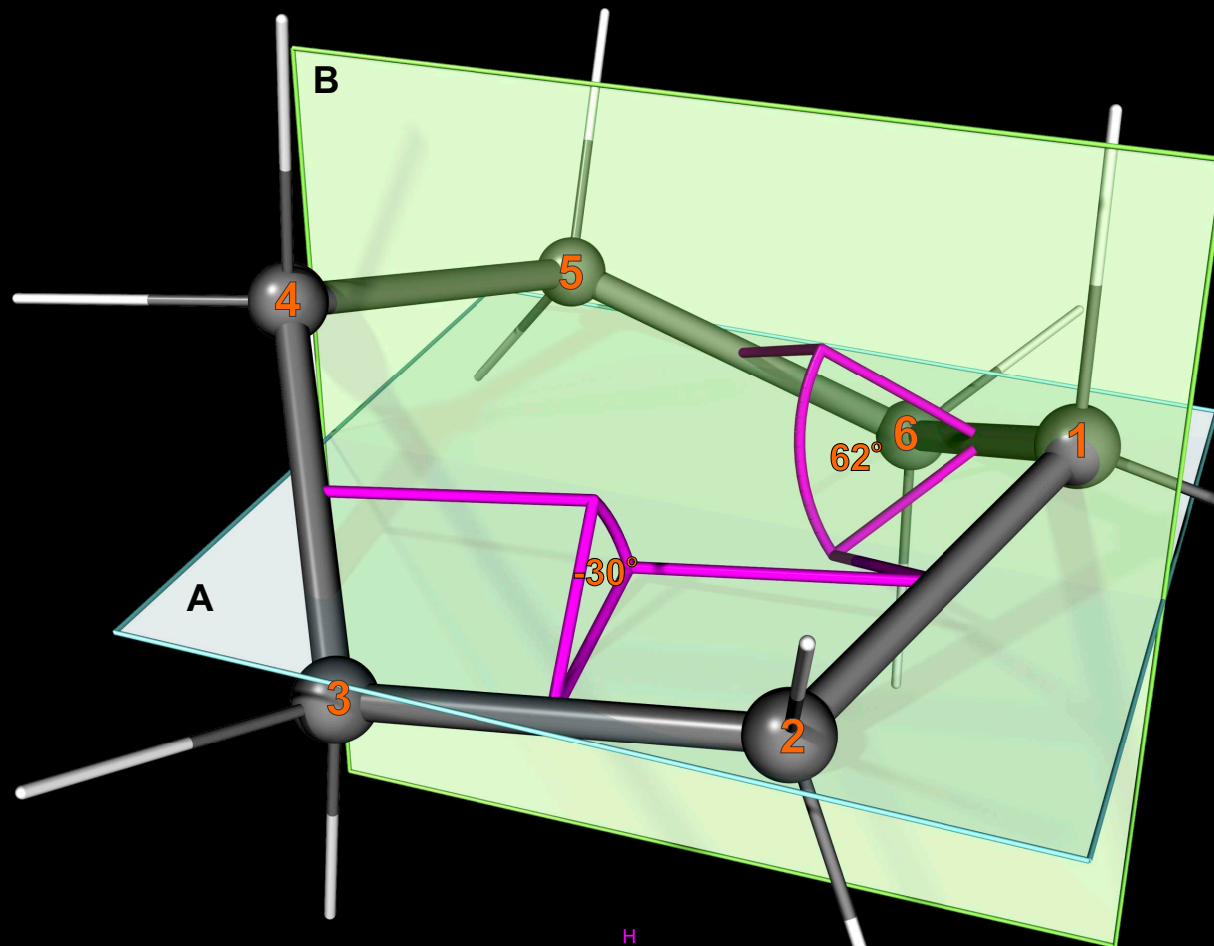
IDENTIČNA KONFORMACIJA LAĐE KAO NA PRETHODNIM SLIKAMA, ALI PRIKAZANA IZ DRUGOG UGLA. NA PRVI POGLED, MOŽE DA IZGLEDA KAO DRUGAČIJA KONFORMACIJA.



GEOMETRIJSKE OSOBINE CIKLOHEKSANA U KONFORMACIJI UVIJENE LAĐE - 3D MODEL



## DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - UVIJENA LAĐA



CIKLOHEKSAN U KONFORMACIJI  
UVIJENE LAĐE.

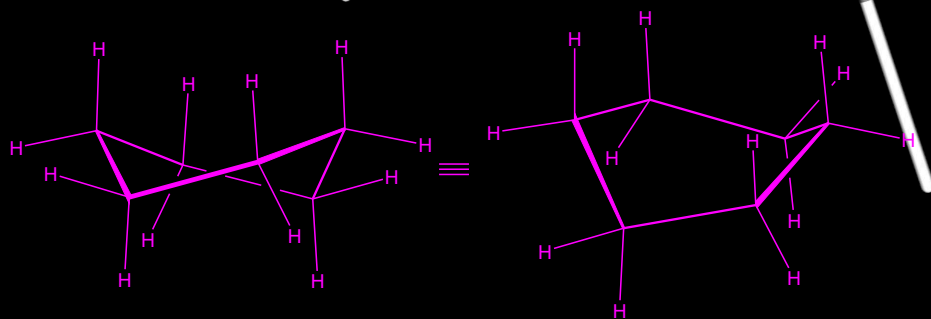
TORZION I UGLOVI KOJI DEFINIŠU  
OVAJ KONFORMER Približno iznose :

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

KONFORMACIJA UVIJENE LAĐE NEMA  
ELEMENTA SIMETRIJE I HIRALNA JE.

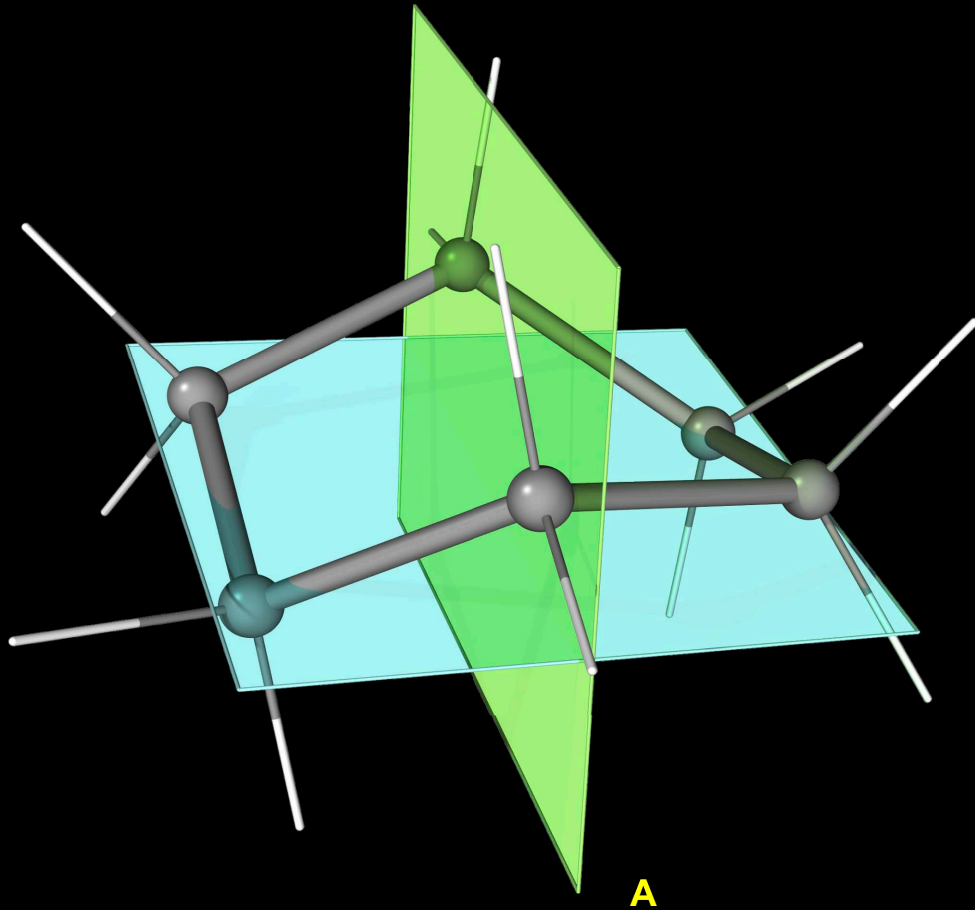
PRIKAZANE RAVNI A I B NISU RAVNI  
SIMETRIJE VEĆ PRETSTAVLJAJU PROJEKCIJE  
RAVNI MOLEKULA.

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

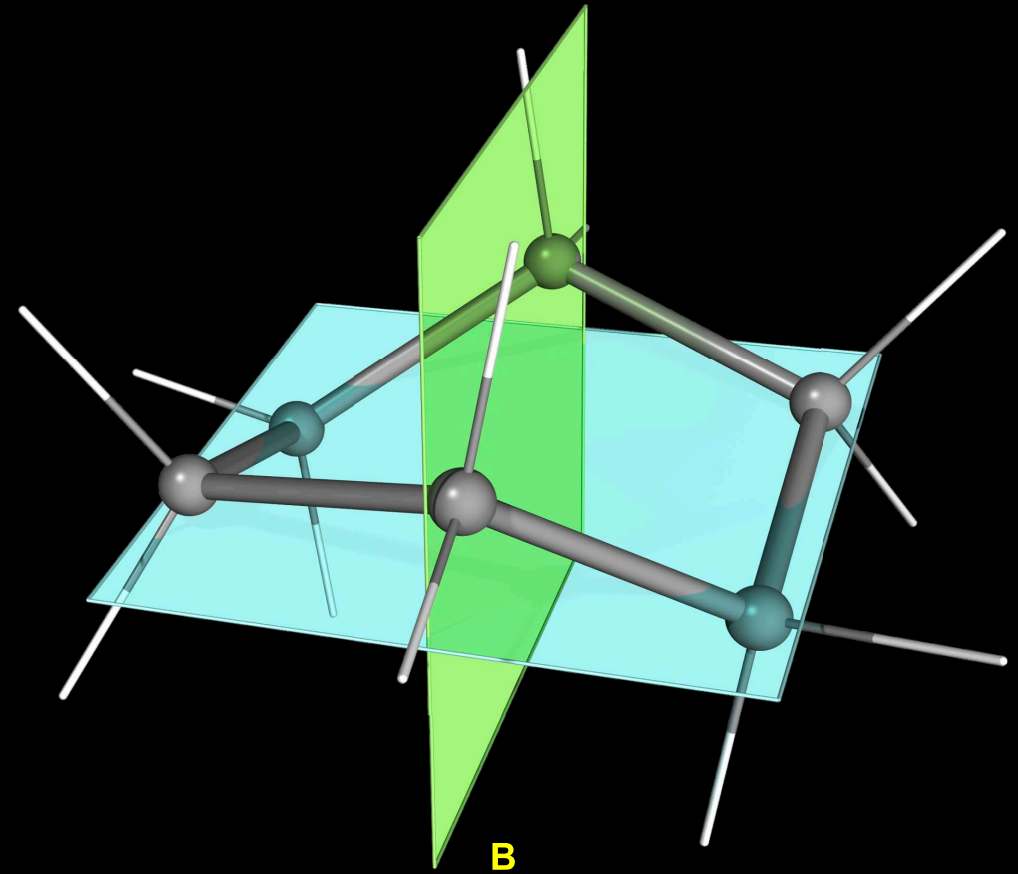


Približna konformaciona  
energija je 5.5 kcal/mol

## DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - UVIJENA LAĐA (nastavak)



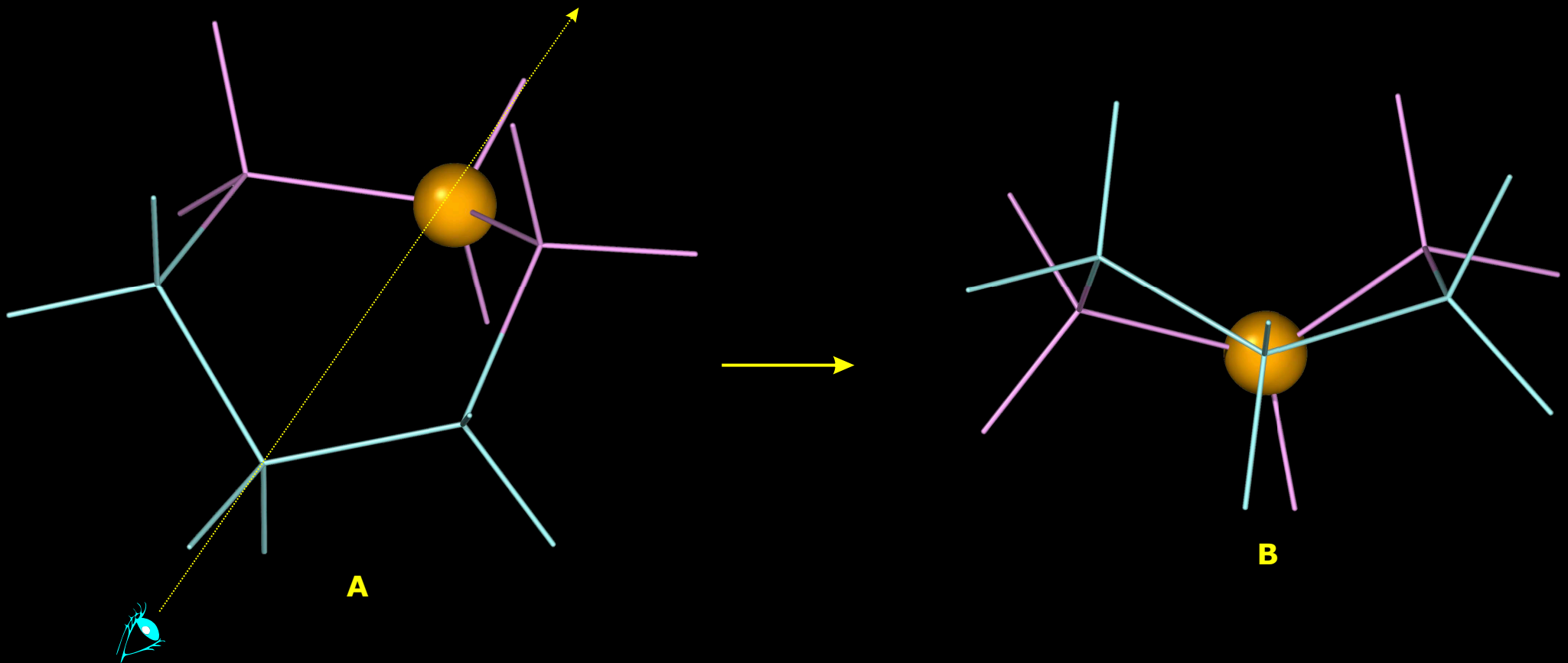
POŠTO JE KONFORMACIJA UVRNUTE LAĐE HIRALNA, ONA MOŽE POSTOJATI U OBLIKU DVA KONFORMACIONA ENANTIOMERA (KONFORMACIONI ENANTIOMERI SE NE MOGU RAZDVOJITI JER, ZBOG VEOMA MALE ENERGETSKE BARIJERE, BRZO PRELAZE JEDAN U



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).

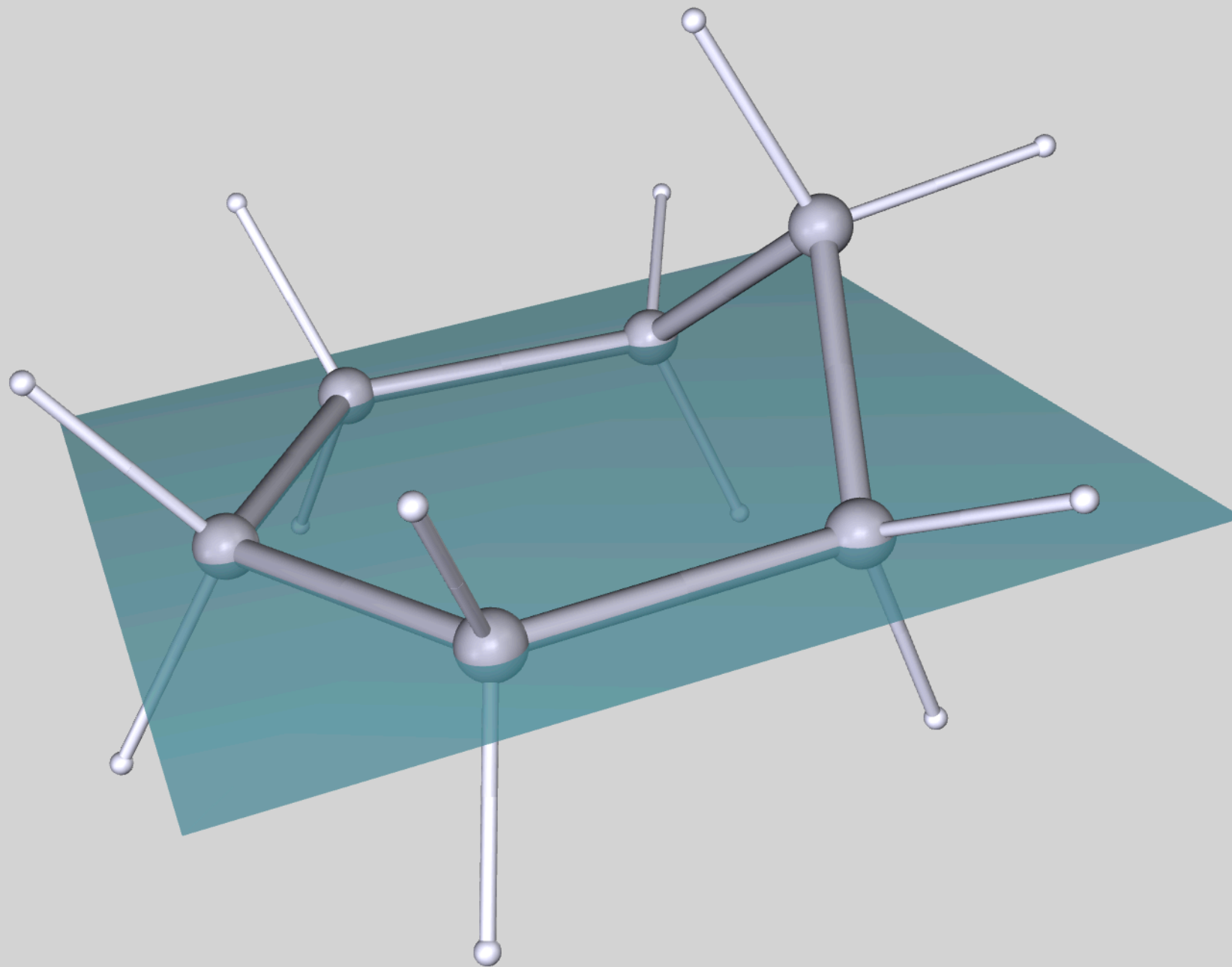
## DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - UVIJENA LAĐA (nastavak)



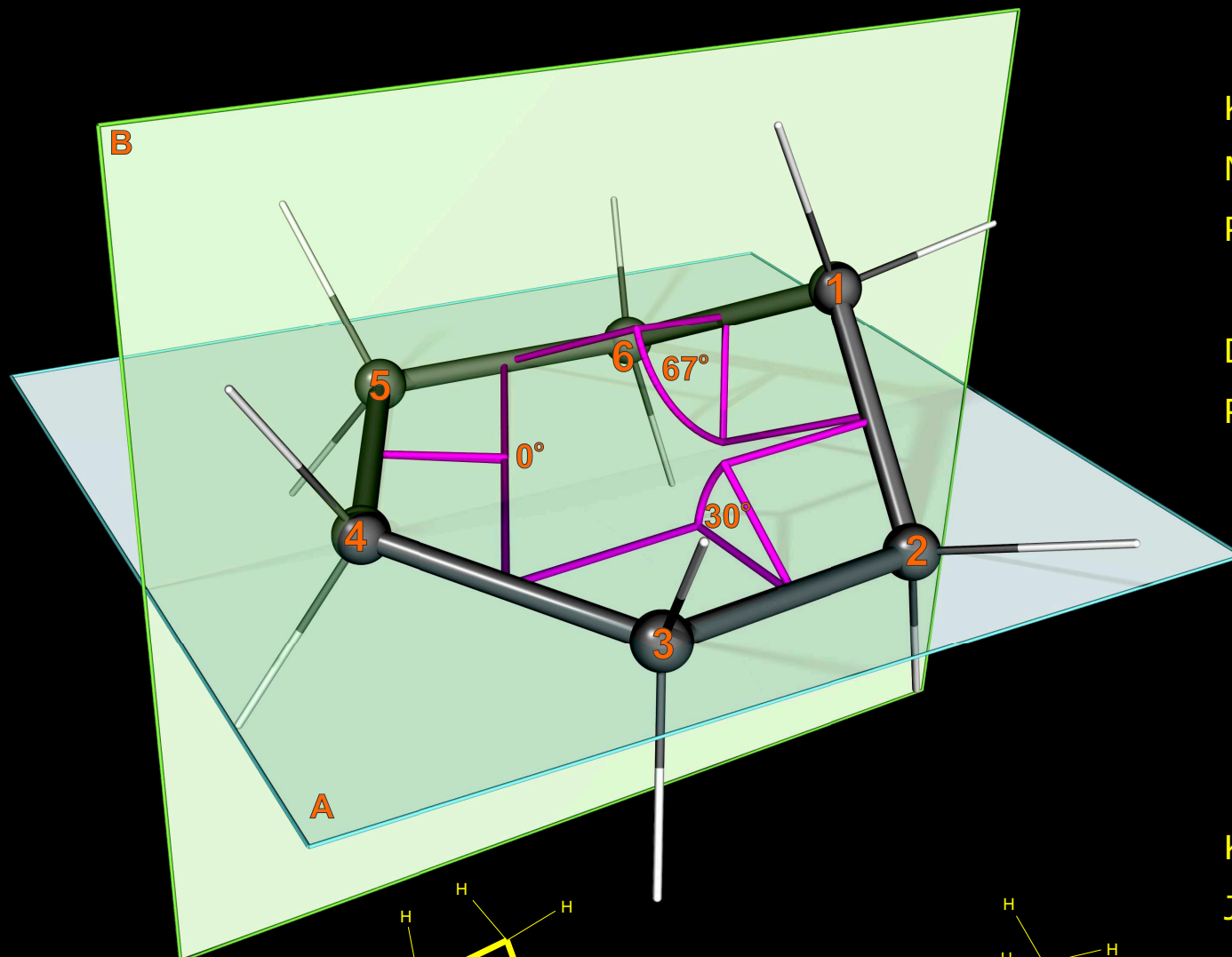
PERSPEKTIVNA PROJEKCIJA UVIJENE LAĐE, STRUKTURA A.. (JEDAN C ATOM PRIKAZAN JE U OBLIKU SFERE A OSTALI KAO LINIJE.) KADA SE OVA STRUKTURA POSMATRA IZ OZNAČENOG

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

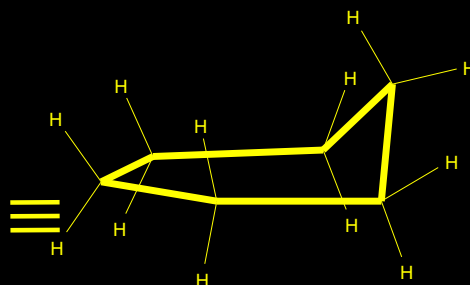
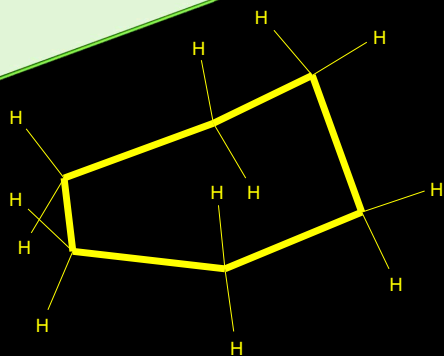


CIKLOHEKSAN U KONFORMACIJI POLUSTOLICE MOŽE SE POSMATRATI KAO "POLU-PLANARNI" CIKLOHEKSAN.

TORZIONI UGLOVI KOJI DEFINIŠU OVAJ KONFORMER PRIBLIŽNO IZNOSE :

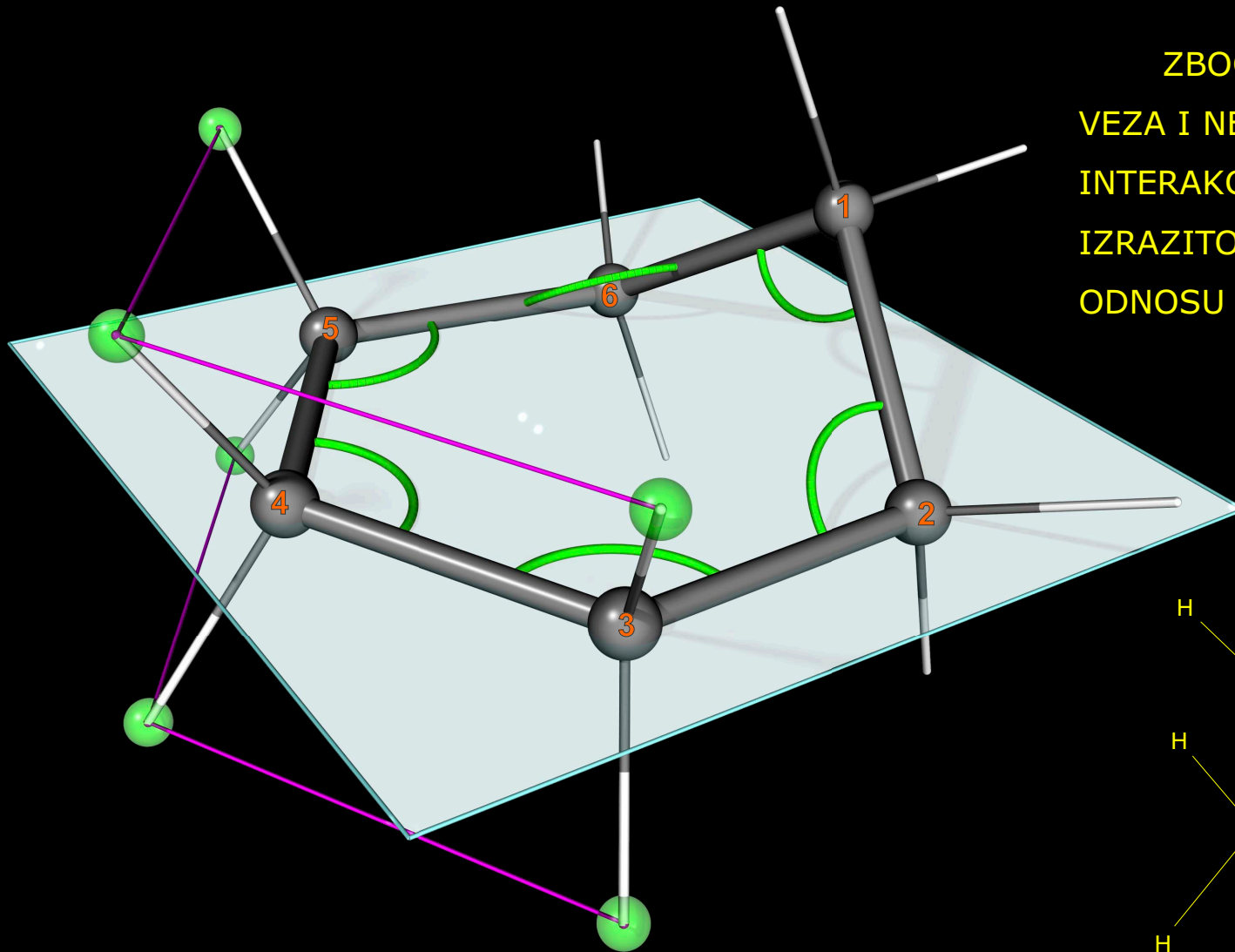
1.  $C_1-C_2-C_3-C_4 \sim 30^\circ$ ;
2.  $C_2-C_3-C_4-C_5 \sim 0^\circ$ ;
3.  $C_3-C_4-C_5-C_6 \sim 0^\circ$ ;
4.  $C_4-C_5-C_6-C_1 \sim -30^\circ$
5.  $C_5-C_6-C_1-C_2 \sim 67^\circ$  i
6.  $C_6-C_1-C_2-C_3 \sim -67^\circ$

KONFORMACIJA POLUSTOLICE IMA JEDNU RAVAN SIMETRIJE (B).

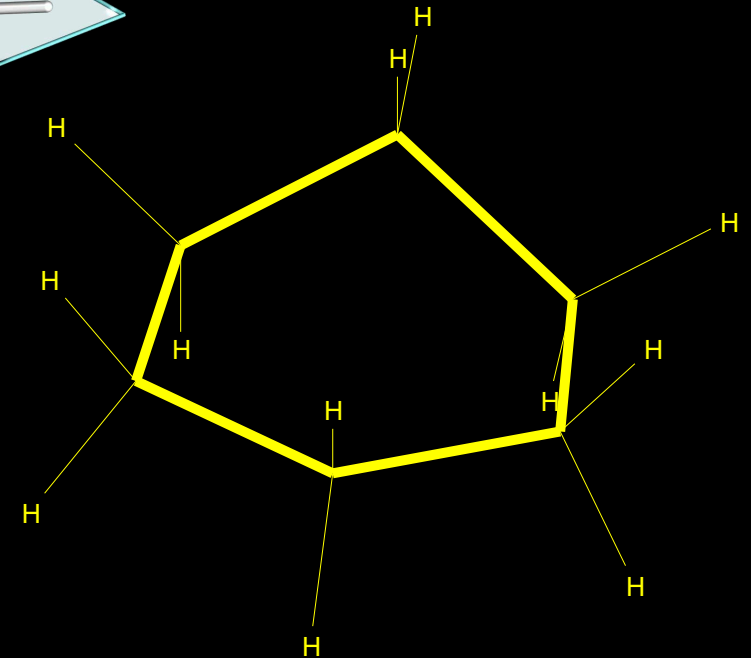




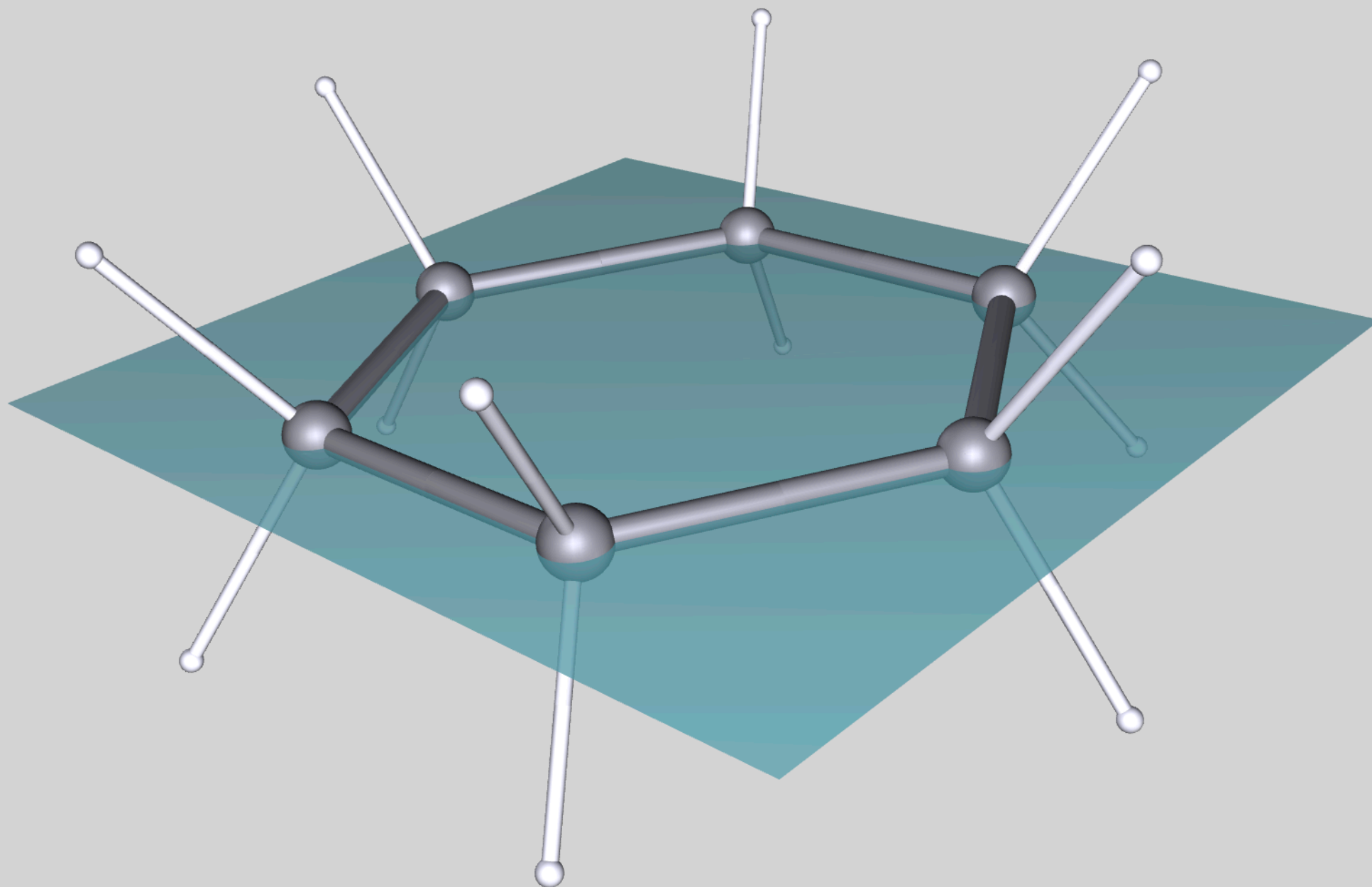
## DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - POLUSTOLICA



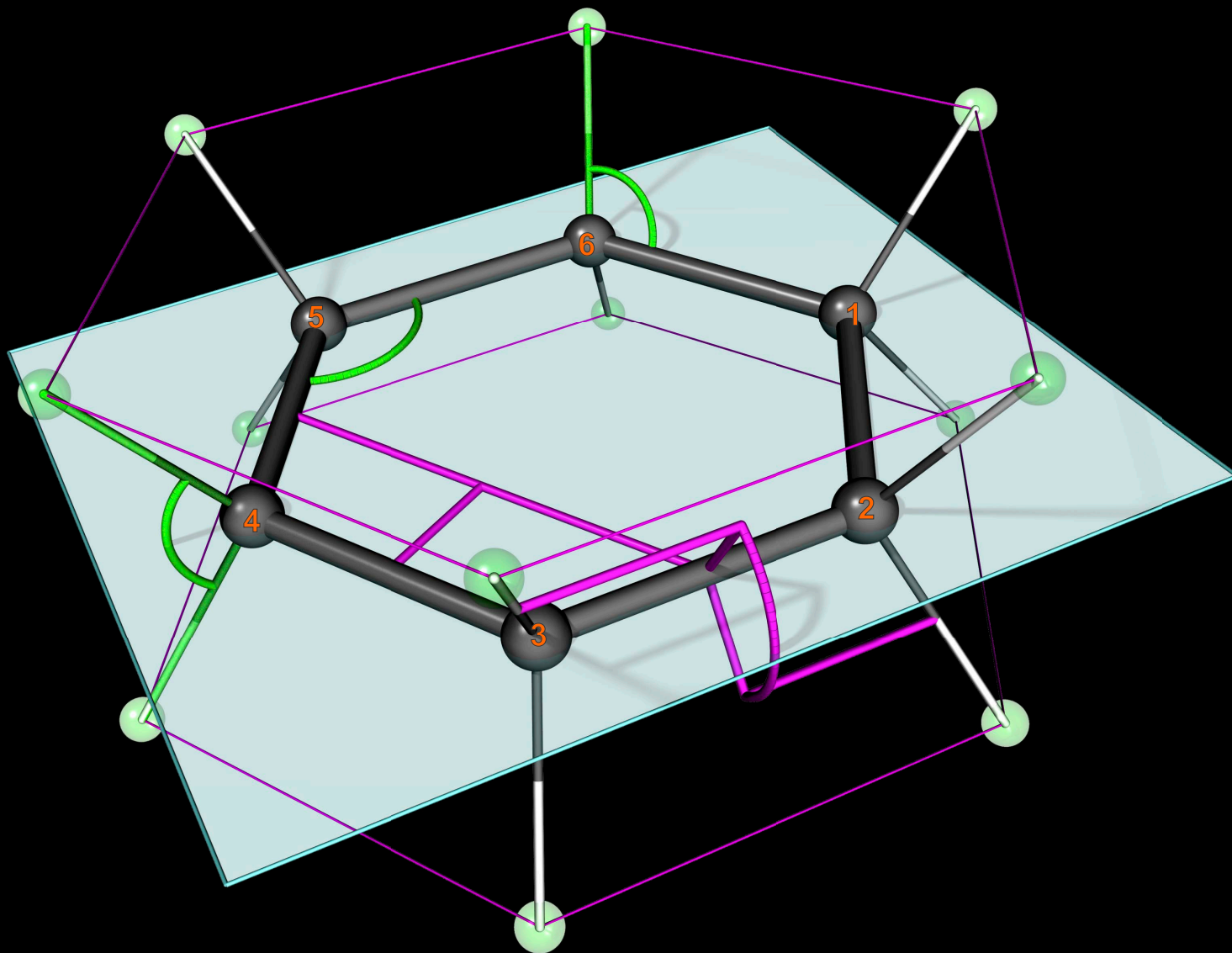
ZBOG VELIKIH DEFORMACIJA UGLOVA VEZA I NEPOVOLJNIH EKLIPSNIH INTERAKCIJA, OVA KONFORMACIJA JE IZRAZITO NESTABILNA, ( $\sim 10.8$  kcal/mol) U ODNOSU NA KONFORMACIJU STOLICE.



DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - PLANARNI CIKLOHEKSAN -3D MODEL



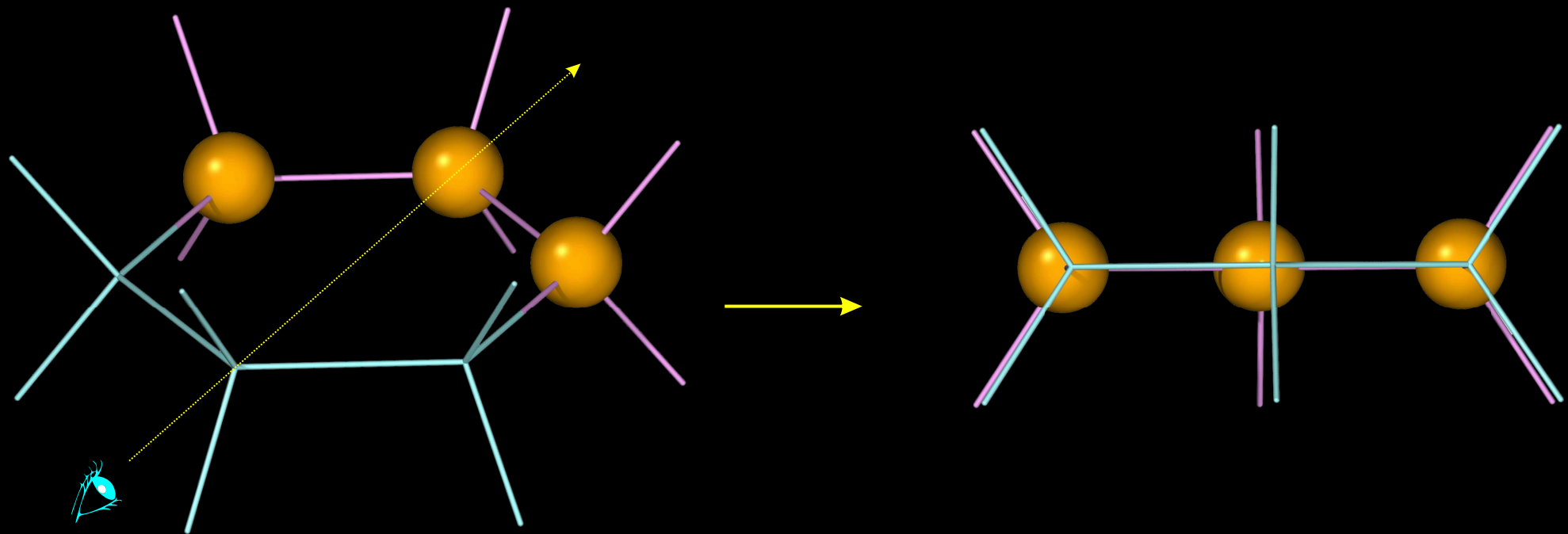
## DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - PLANARNI CIKLOHEKSAN



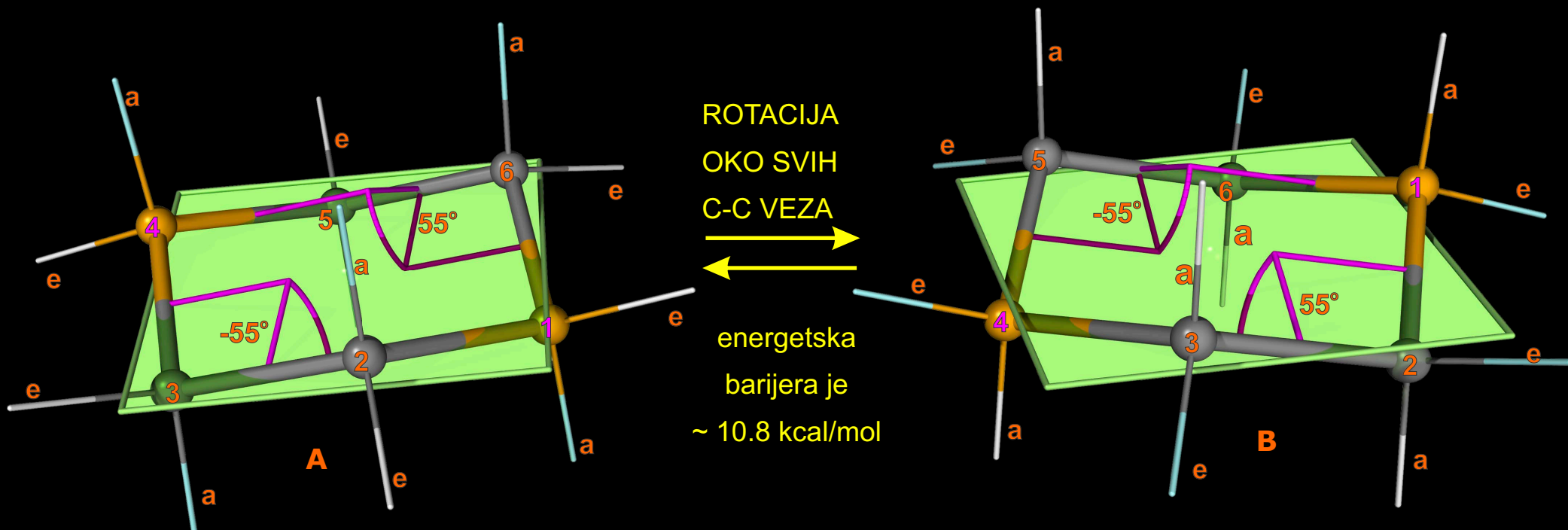
ZBOG VELIKIH  
DEFORMACIJA SVIH UGLOVA  
VEZA I NEPOVOLJNIH  
EKLIPSNIH INTERAKCIJA SVIH  
VEZA, OVA KONFORMACIJA JE  
NAJNESTABILNIJA  
KONFORMACIJA CIKLOHEKSANA  
, ( $\gg 10.8$  kcal/mol) U ODNOSU  
NA KONFORMACIJU STOLICE.

# DRUGE KONFORMACIJE CIKLOHEKSANA - PLANARNI CIKLOHEKSAN

(NEWMAN-ove PROJEKCIJE STRUKTURE)



## DINAMIČKA RAVNOTEŽA RAZLIČITIH KONFORMERA CIKLOHEKSANA

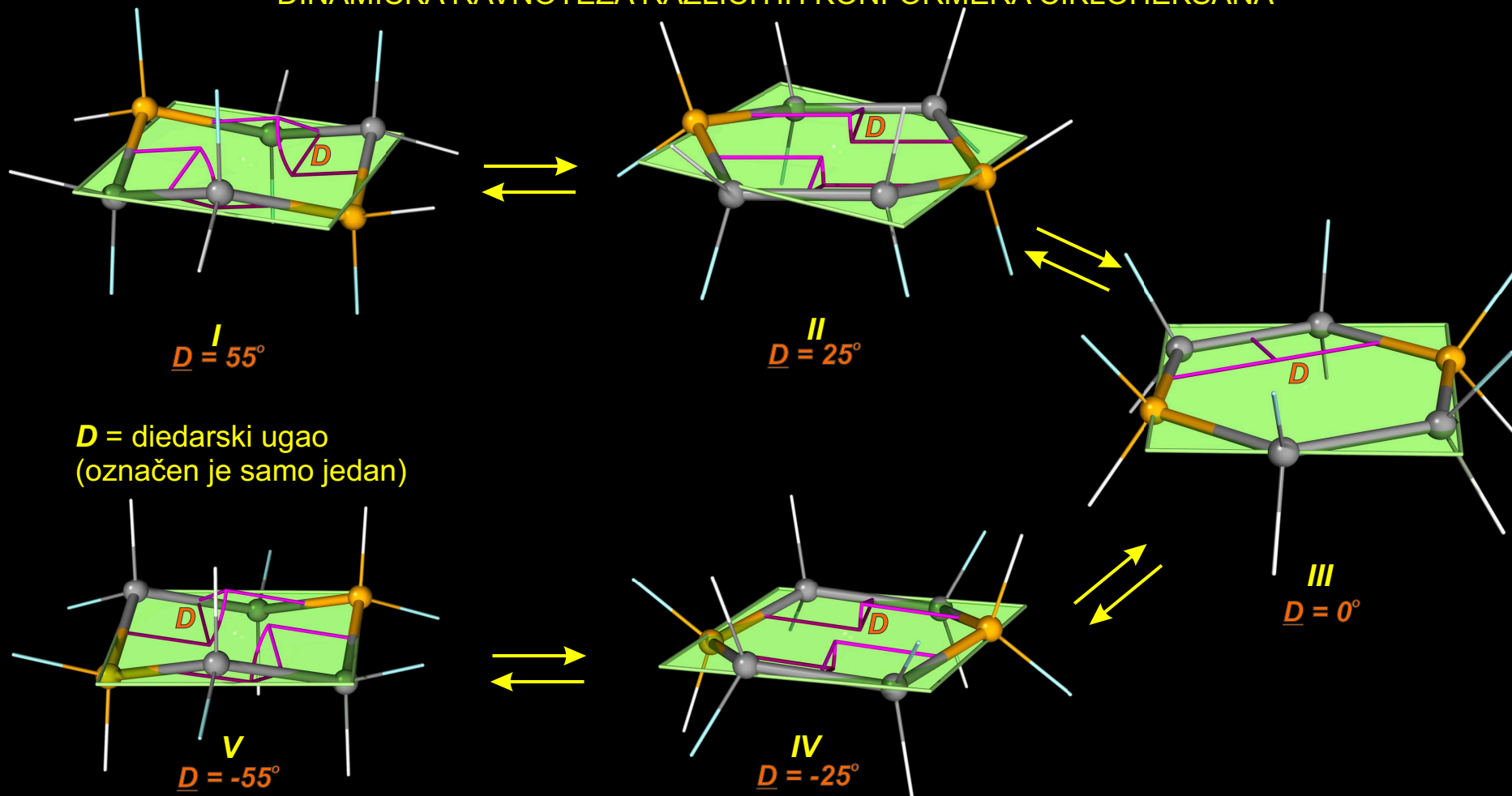


Dve konformacije stolice cikloheksana kontinualno prelaze jedna u drugu slobodnom rotacijom oko C-C veza. Između ove dve konformacije nalazi se neograničeni broj drugih konformacija koje su energetski manje povoljne (imaju viši sadržaj energije), ali na  $\sim 20^\circ\text{C}$  molekul cikloheksana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

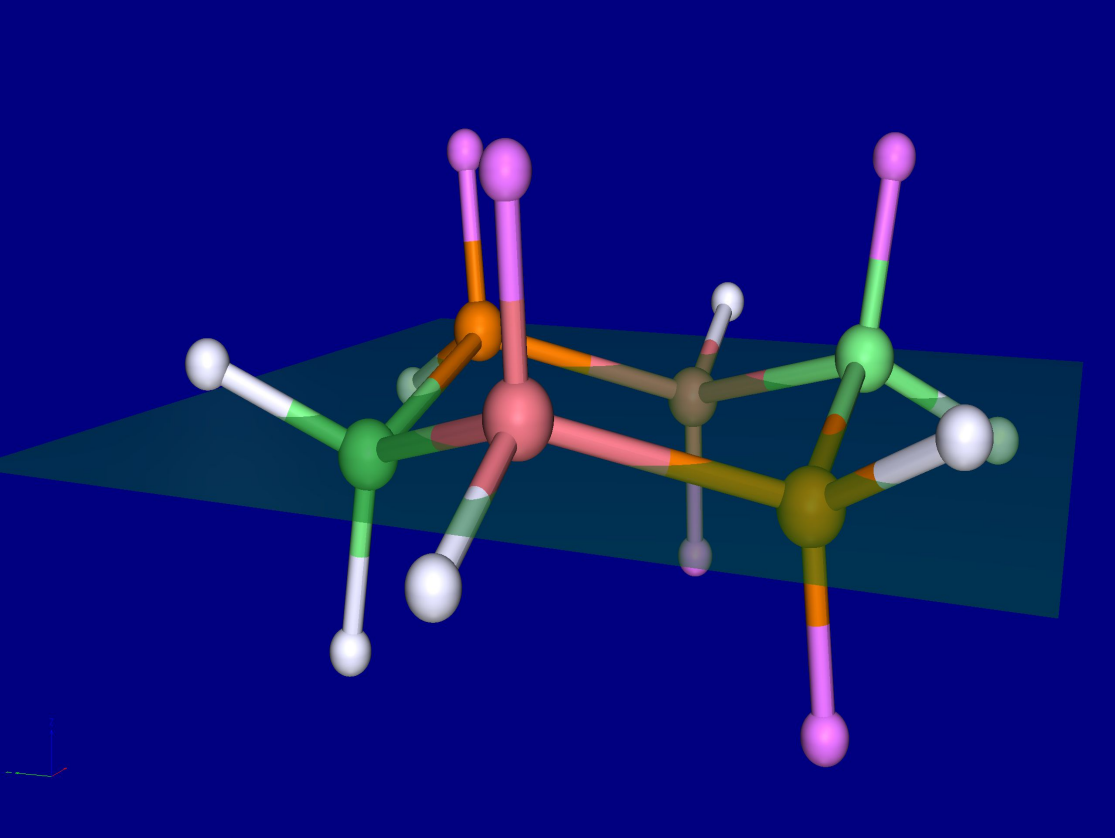
belom, dok su atomi  $C_1$  i  $C_4$  oranž, struktura A. Tokom inverzije, svi aksijalni H atomi postaju ekvatorijalni i obrnuto. Takođe, svi C atomi menaju svoj relativni položaj u odnosu projekcionu ravan molekula - oni koji su u strukturi A bili iznad projekcione ravni ( $C_2$ ,  $C_4$  i  $C_6$ ) 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.

## DINAMIČKA RAVNOTEŽA RAZLIČITIH KONFORMERA CIKLOHEKSANA



Veoma pojednostavljeni prelaz konformera stolice I u ekvivalentni konformer stolice V, preko intermedijernih konformera II, III i IV. Ovde je prikazana inverzija preko planarnog konformera III, što ne mora biti tačno (realni put je složeniji).

Tokom inverzije, diedarski uglovi ( $\underline{D}$ ) se postepeno smanjuju, dostižu vrednost  $0^\circ$  kod konformera III a zatim ponovo rastu, ali sa suprotnim predznakom. U svakom slučaju, tokom inverzije, postaju i drugi granični konformeri, tj. lađa i uvijena lađa.



## 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.:

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

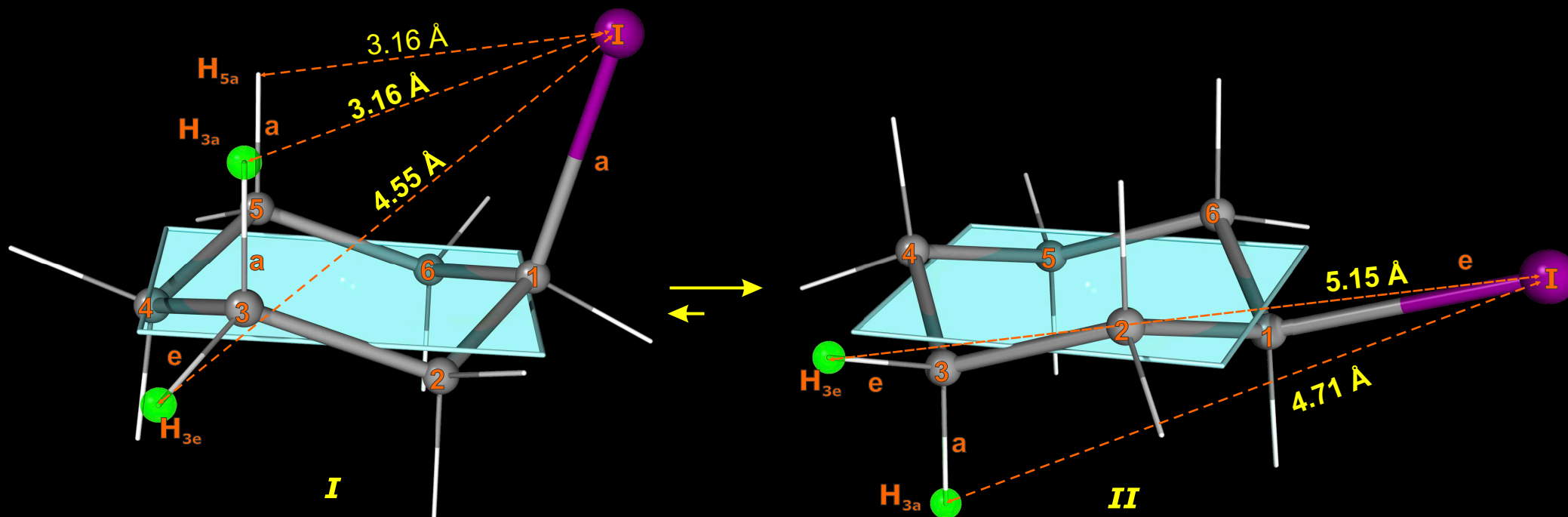
$\text{O} < \text{S} < \text{Se}$

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.



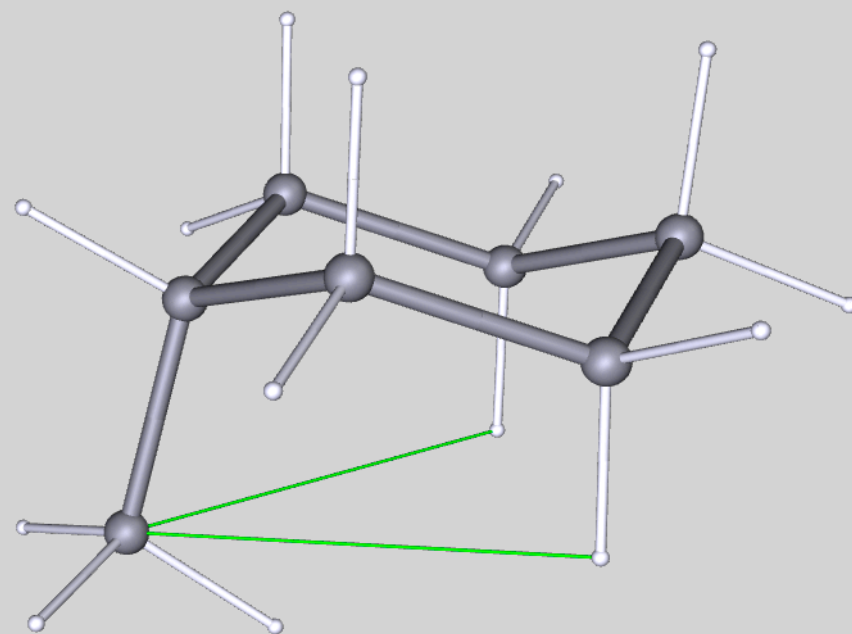
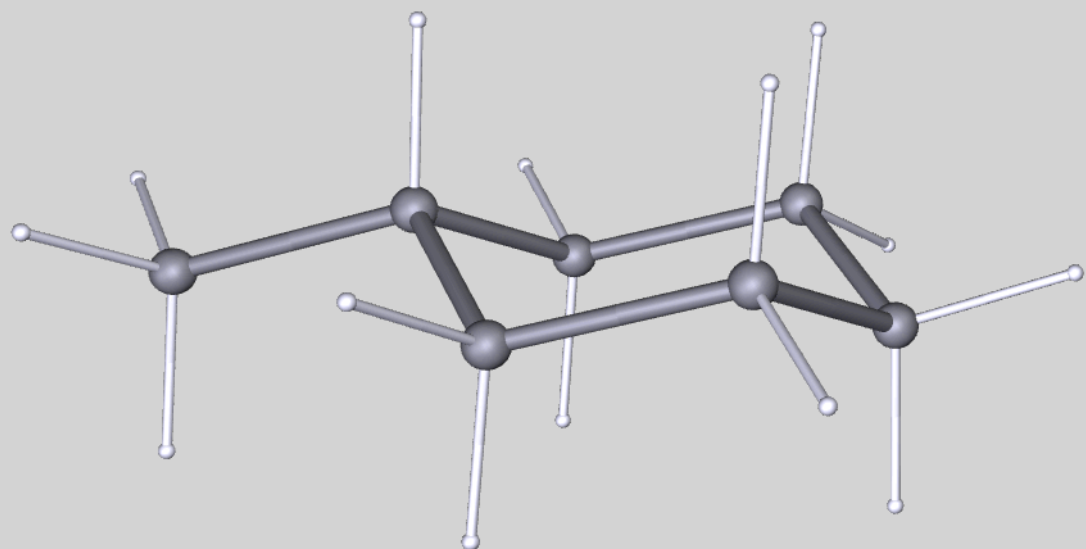
## KONFORMACIJE SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA



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<sub>3a</sub> i H<sub>5a</sub>, što dovodi do međusobnog odbijanja i destabilizacije konformera. (Atomi H<sub>3a</sub> i H<sub>5a</sub> su obeleženi zelenim sferama). Ovakve interakcije generalno se označavaju kao 1,3- interakcije i karakteristične su za aksijalni konformer. Kod ekvatorijalnog konformera,

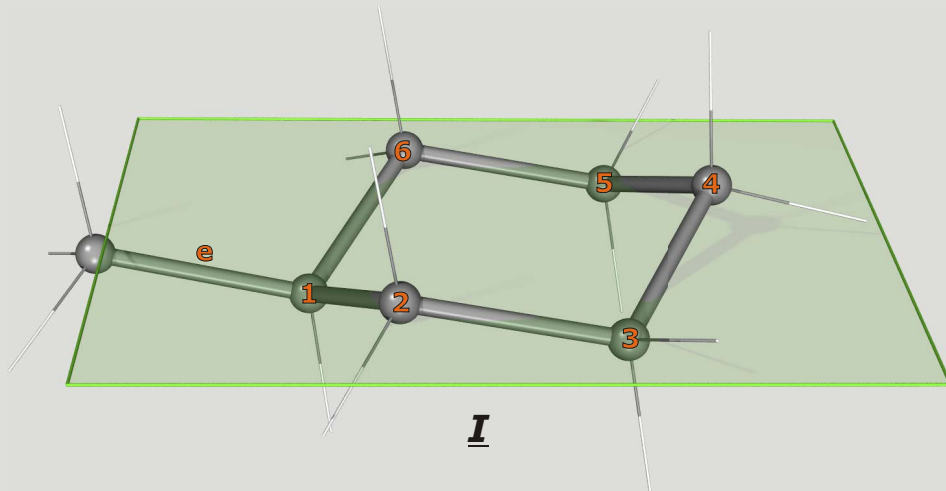
struktura *II*, 1,3- interakcije nisu prisutne, jer su rastojanja između istih atoma daleko veća. Stoga je opšte pravilo da su aksijalni konformeri manje stabilni od ekvatorijalnih. U konkretnom primeru, ekvatorijalni konformer je stabilniji od aksijalnog za ~0.46 kcal/mol. Konsekventno, u dinamičkoj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

# KONFORMACIJE SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA METILCIKLOHEKSAN - 3D MODEL

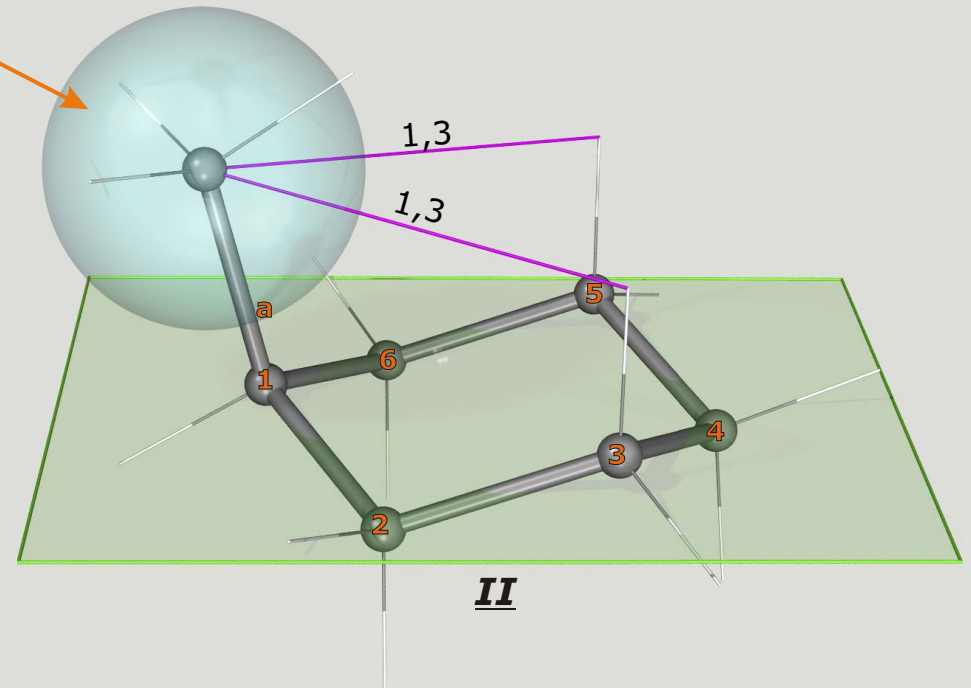


# KONFORMACIJE SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - METILCIKLOHEKSAN

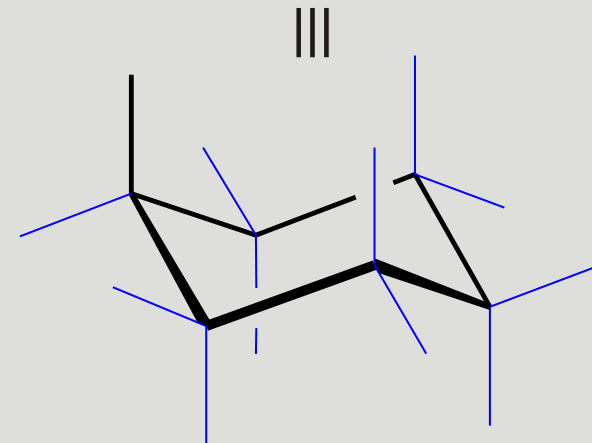
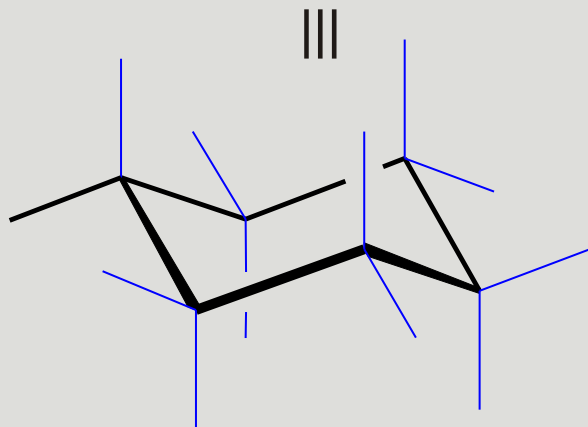
VOLUMINOZNOST  
(ZAPREMINA) CH<sub>3</sub> GRUPE



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

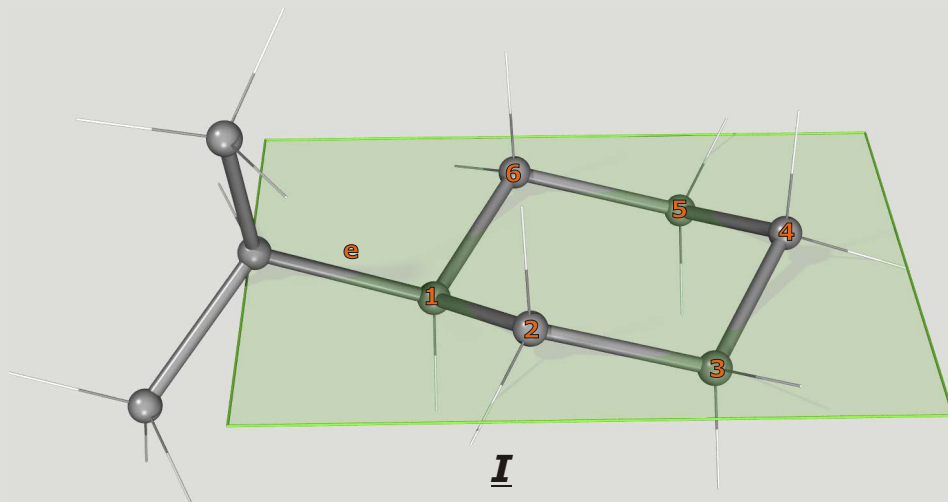


**II**  
AKSIJALNI KONFORMER, NE-STABILNIJI  
JE OD EKVATORIJALNOG ZA ~ 1.70 kcal/mol  
ZBOG 1,3-ODBOJNIH INTERAKCIJA

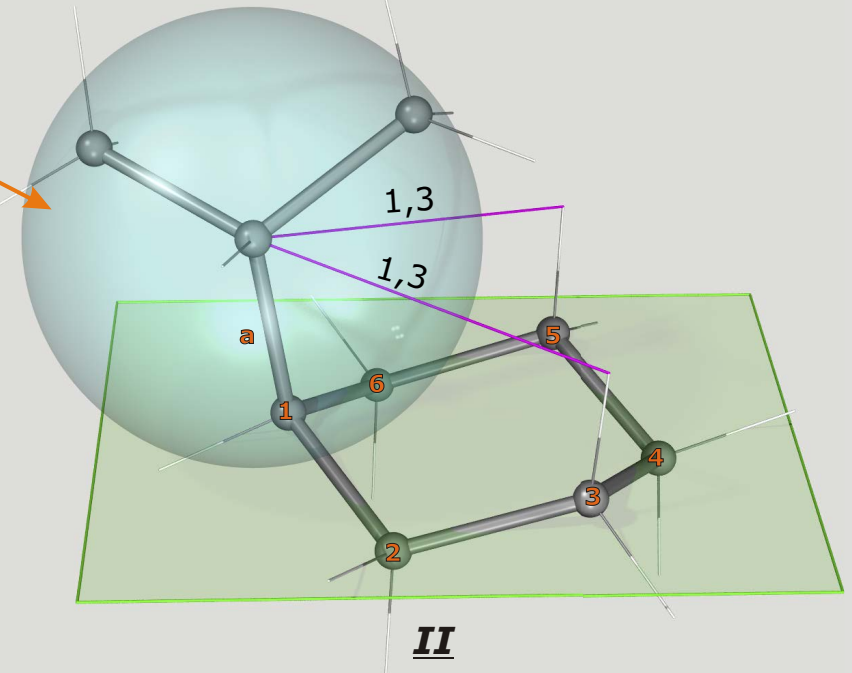


# KONFORMACIJE SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - *izo*-PROPIL-CIKLOHEKSAN

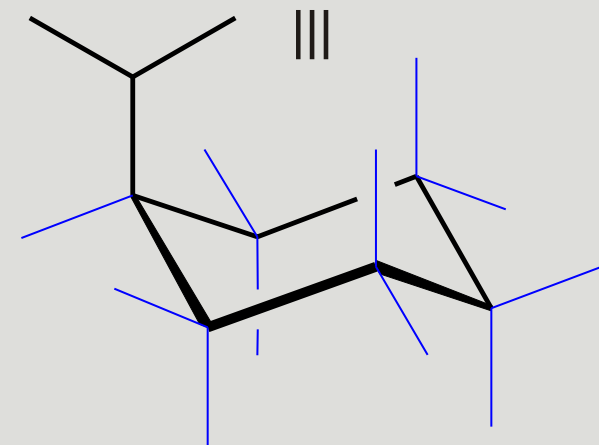
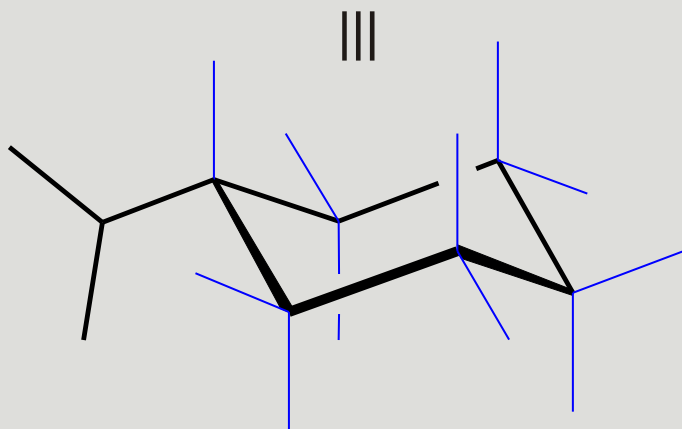
VOLUMINOZNOST  
(ZAPREMINA)  
*izo*-PROPIL GRUPE



**I**  
EKVATORIJALNI KONFORMER, STABILNIJI  
JE OD AKSIJALNOG ZA  $\sim 2.20$  kcal/mol JER  
NEMA 1,3-ODBOJNIH INTERAKCIJA

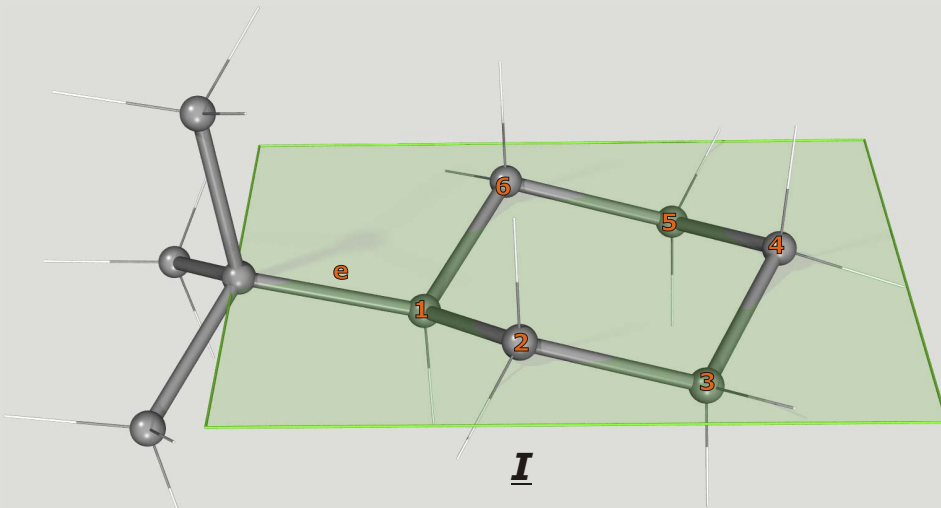


**II**  
AKSIJALNI KONFORMER, NE-STABILNIJI  
JE OD EKVATORIJALNOG ZA  $\sim 2.20$  kcal/mol  
ZBOG 1,3-ODBOJNIH INTERAKCIJA

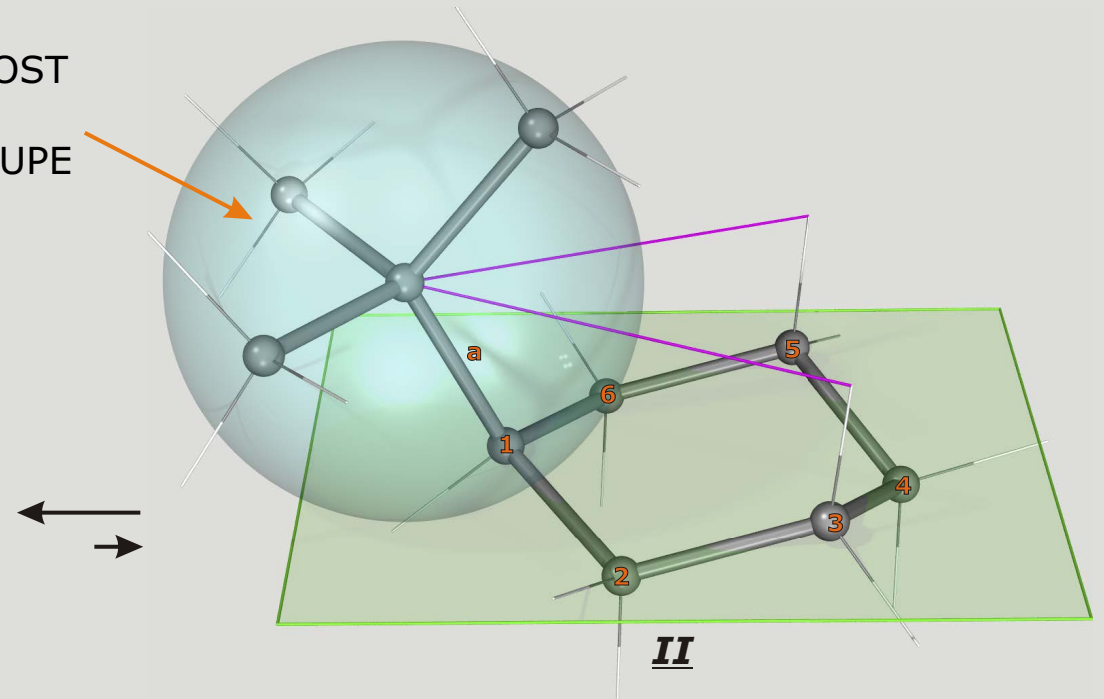
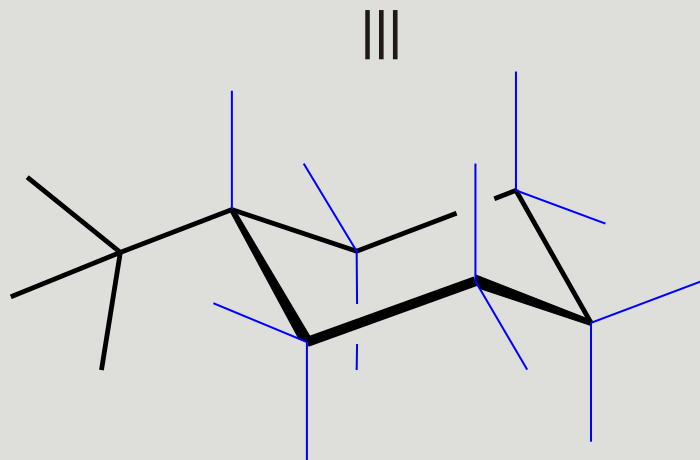


# KONFORMACIJE SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - *tert*-BUTIL-CIKLOHEKSAN

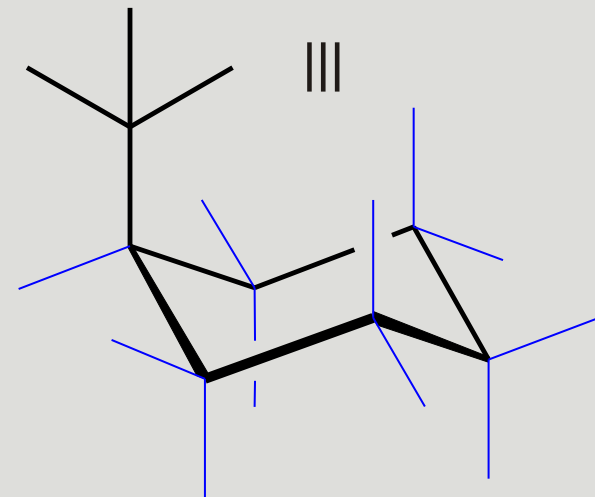
VOLUMINOZNOST  
(ZAPREMINA)  
*tert*-BUTIL GRUPE



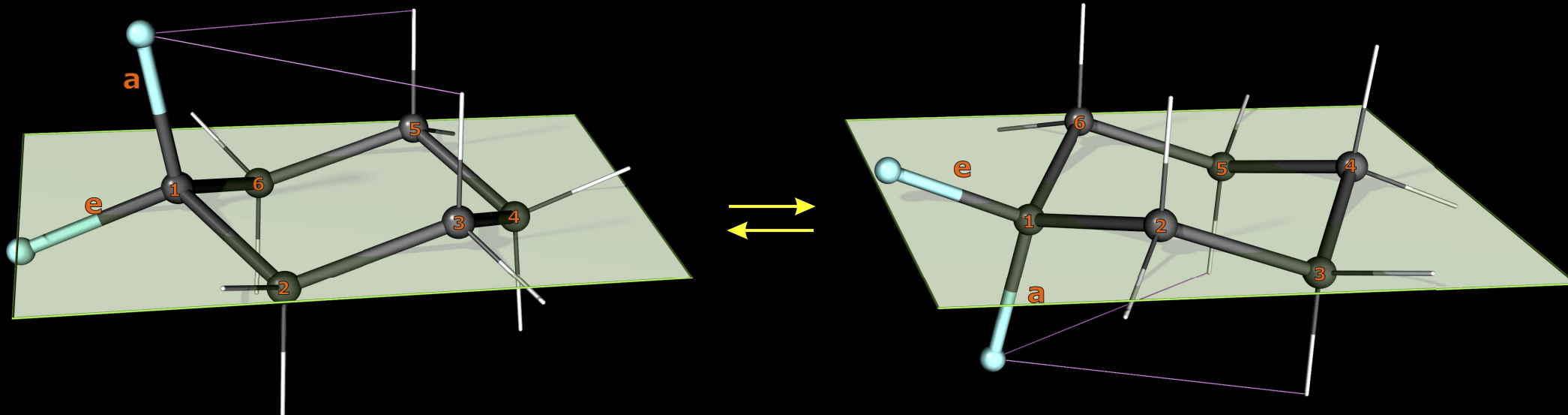
EKVATORIJALNI KONFORMER, STABILNIJI  
JE OD AKSIJALNOG ZA  $\sim 5.0$  kcal/mol JER  
NEMA 1,3-ODBOJNIH INTERAKCIJA



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



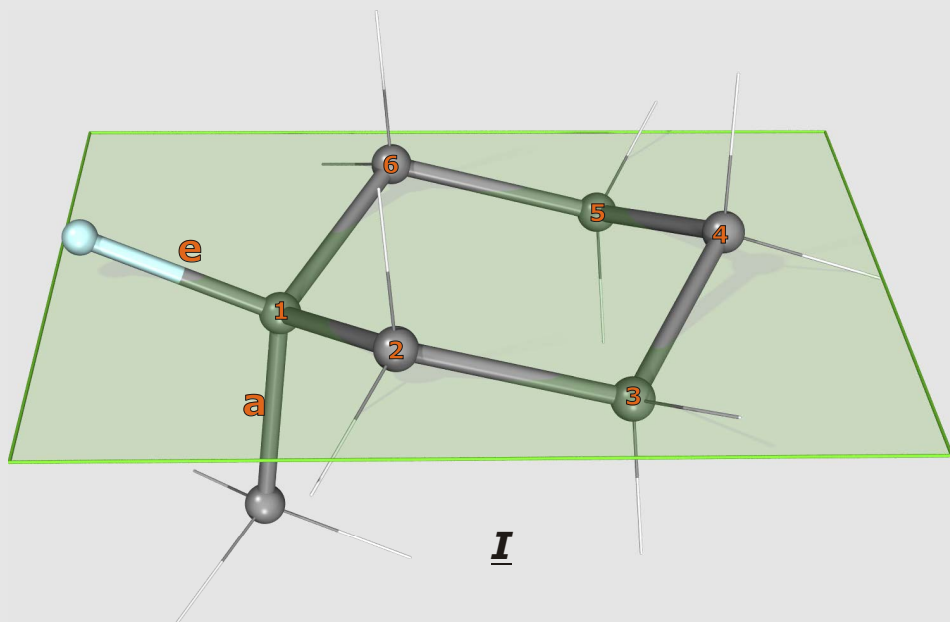
## KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - 1,1 DI-FLUOR-CIKLOHEKSAN



KOD CIKLOHEKSANA KOJI SU SUPSTITUISANI NA ISTOM C ATOM, ISTIM SUPSTITUENTIMA (H, F, CH<sub>3</sub> itd.) JEDAN SUPSTITUENT JE UVEK EKVATORIJALAN A DRUGI UVEK AKSIJALAN. STOGA ONI IMAJU IDENTIČNE KONFORMACIONE

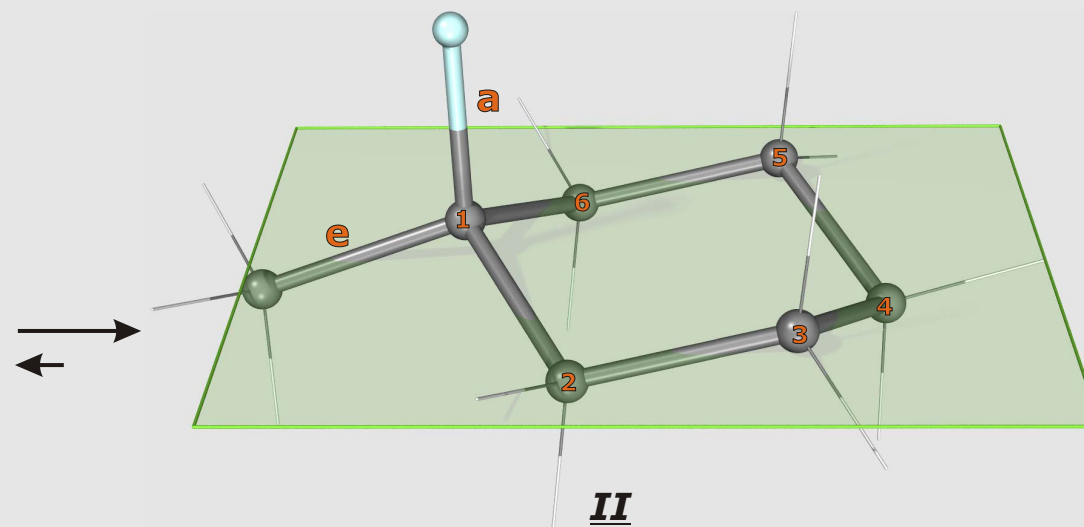
ENERGIJE. MEĐUTIM, AKO SU SUPSTITUENTI RAZLČITI, STABILNIJI JE ONAJ KONFORMER KOD KOGA JE VEĆI SUPSTITUENT U EKVATORIJALNOM POLOŽAJU. (sledeća strana).

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



POŠTO JE FLUOR MANJE VOLUMINOZAN OD METIL GRUPE, SLEDI:

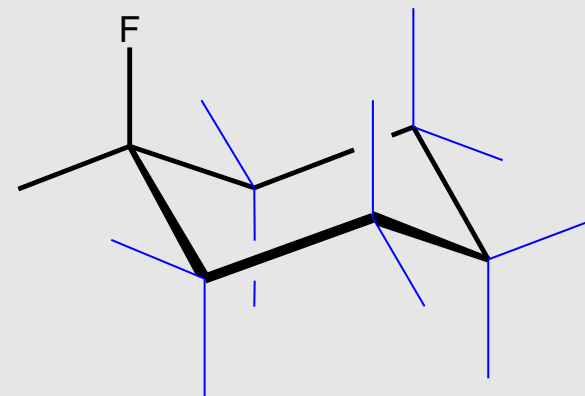
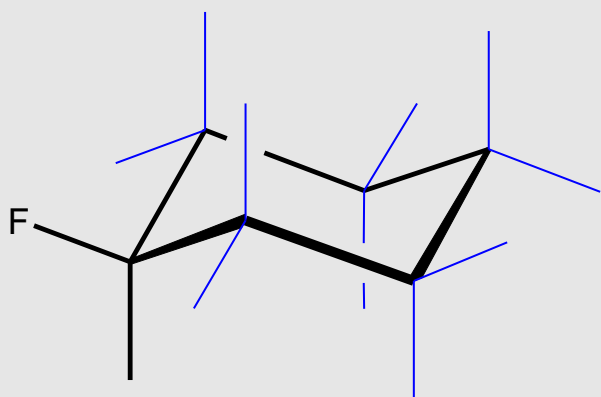
KONFORMER **I**, U KOME JE METIL GRUPA AKSIJALNA, MANJE JE STABILAN OD SUPROTNOG KONFORMERA **II**, U KOME JE METIL GRUPA



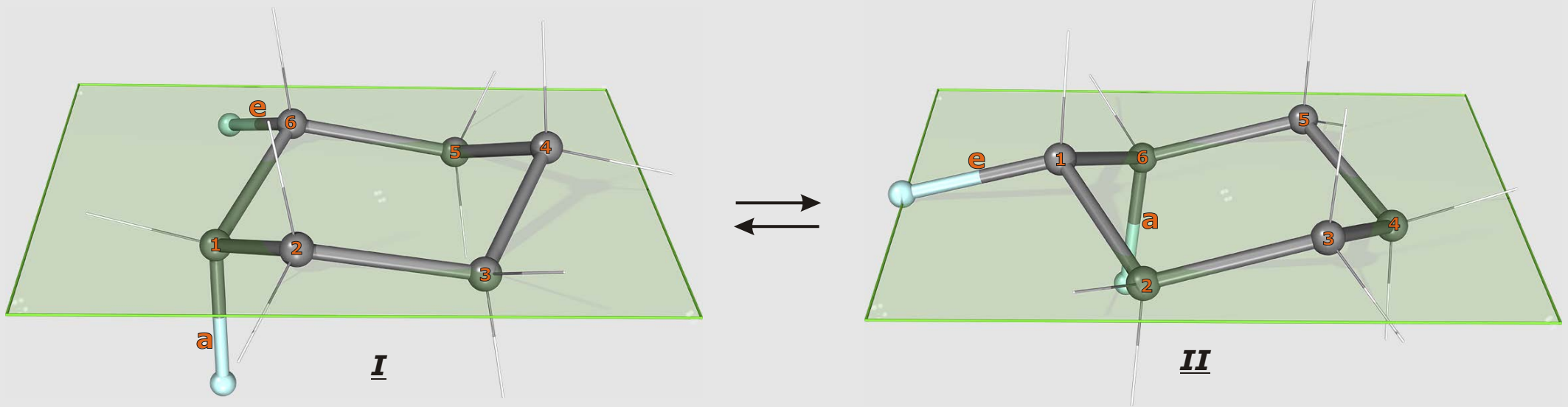
EKVATORIJALNA.

DAKLE:

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



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

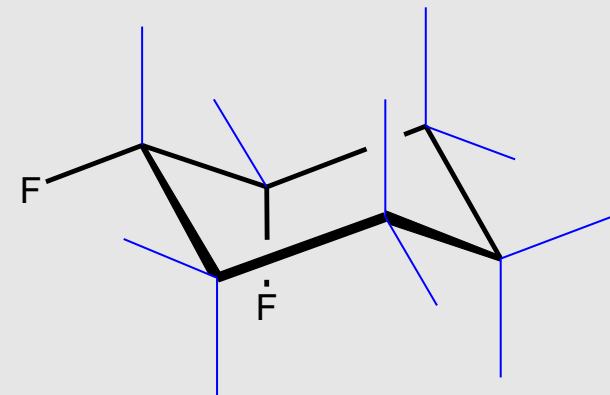
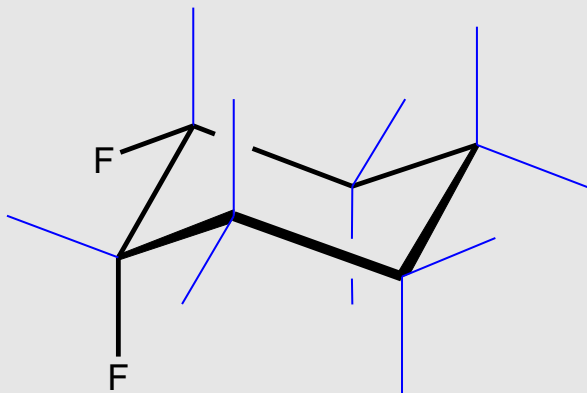


POŠTO JE KOD OBA KONFORMERA JEDAN ATOM FLUORA AKSIJALAN A DRUGI EKVATORIJALAN, SLEDI:

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

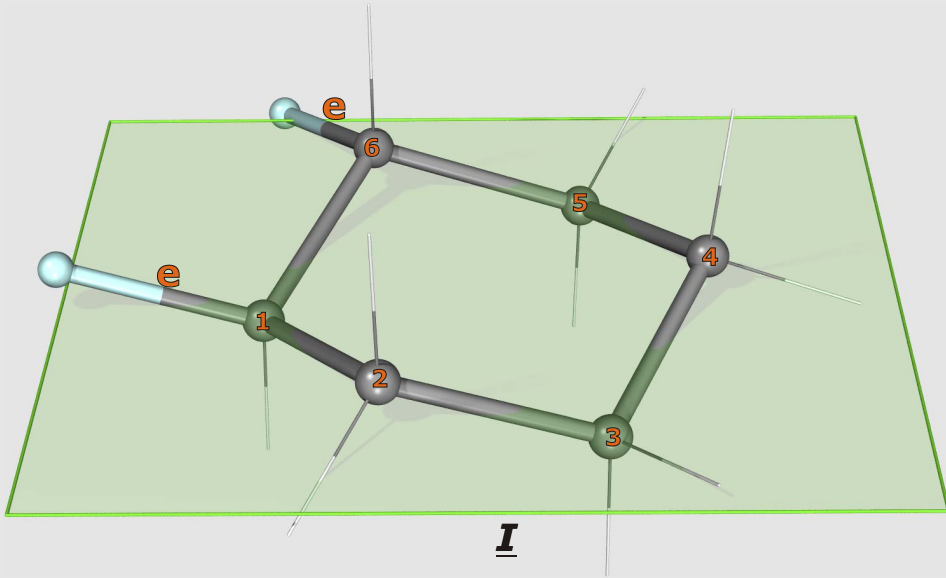
DAKLE:

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





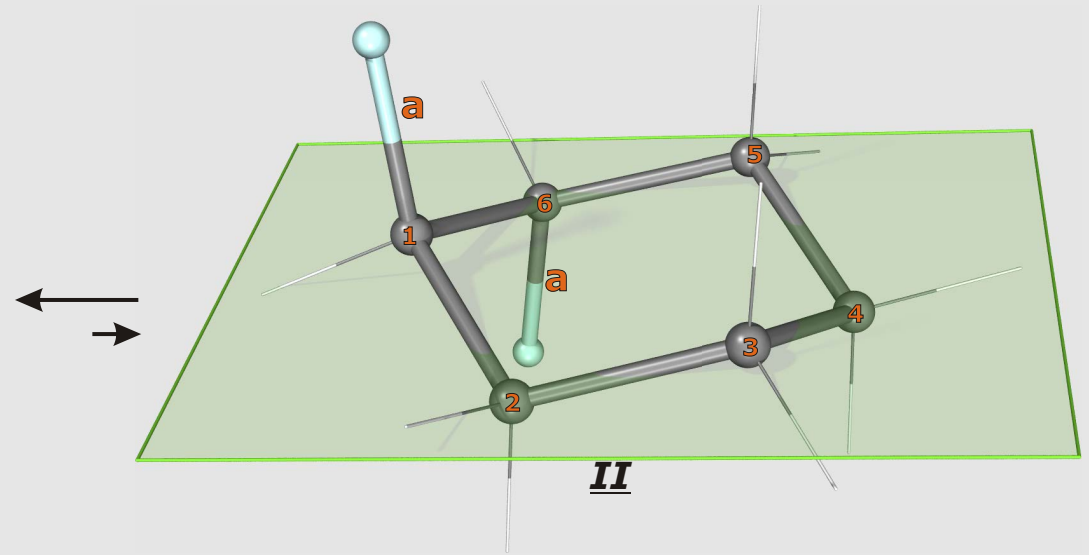
# KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - trans-1,2 DI-FLUOR-CIKLOHEKSAN



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

SLEDI:

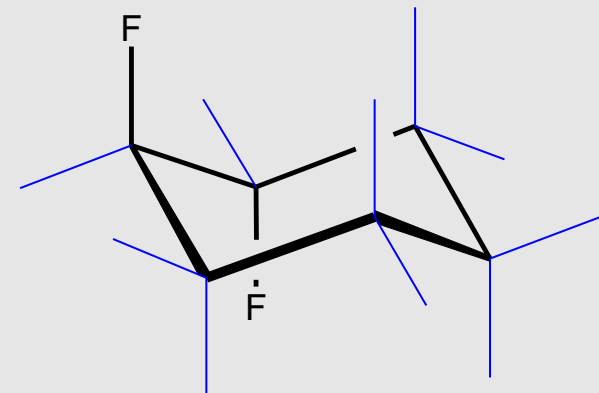
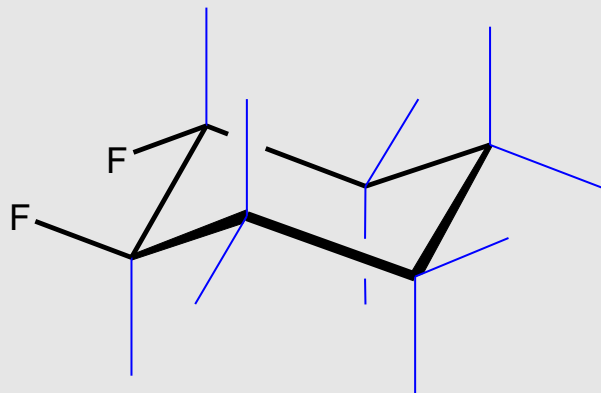
KONFORMER I JE DALEKO STABILNIJI OD



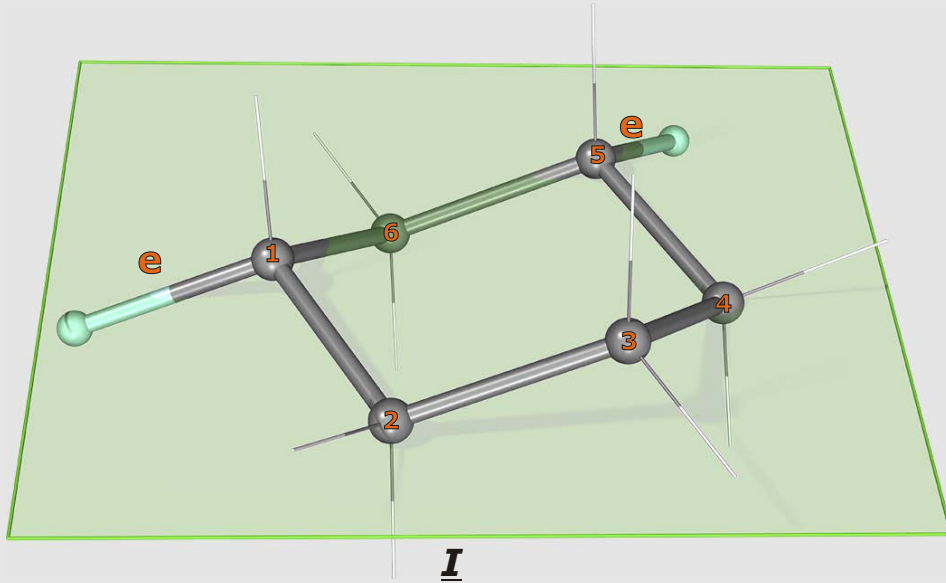
KONFORMERA II.

DAKLE:

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



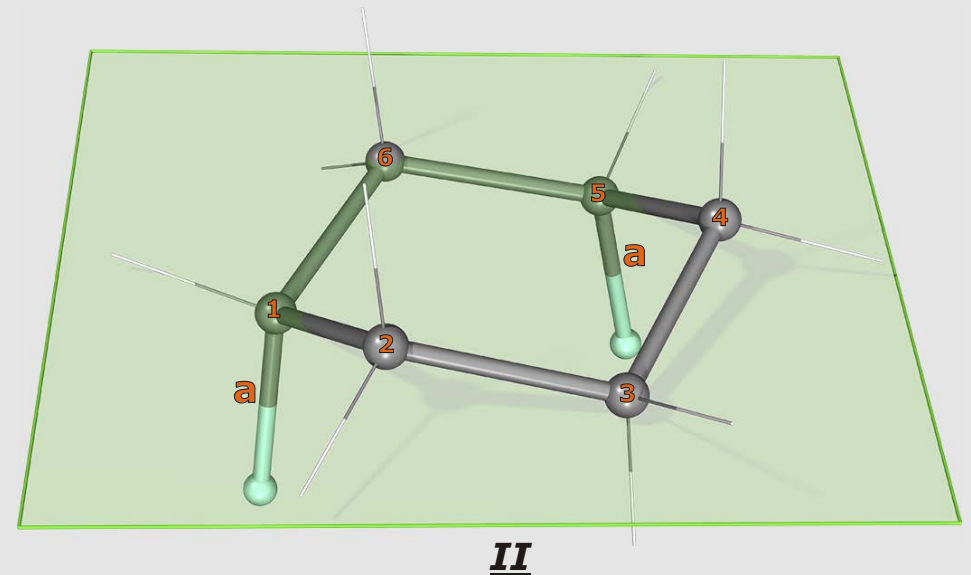
# KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - cis-1,3 DI-FLUOR-CIKLOHEKSAN



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

SLEDI:

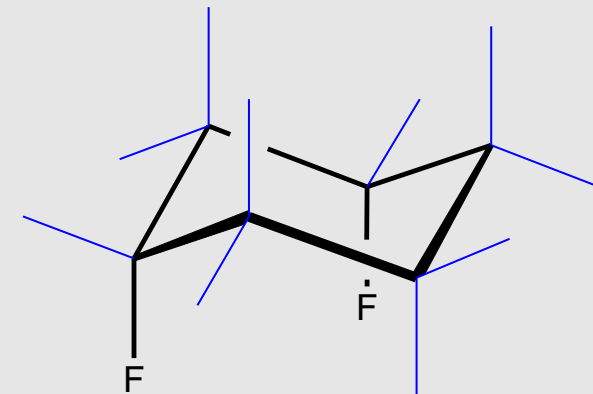
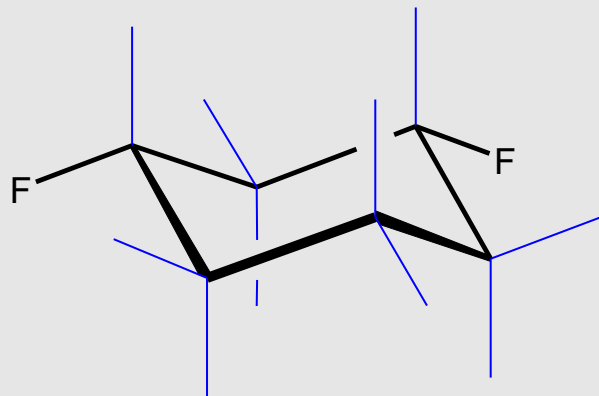
KONFORMER **I** JE DALEKO STABILNIJI OD



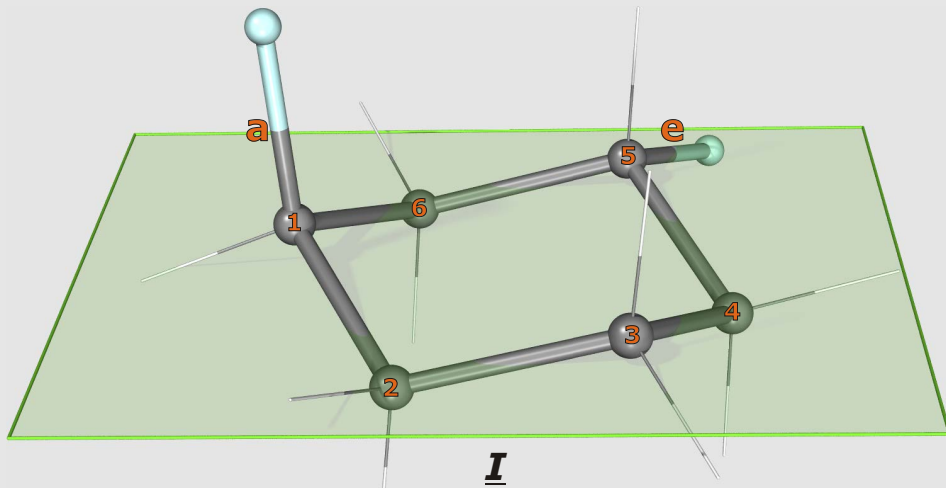
KONFORMERA **II**.

DAKLE:

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

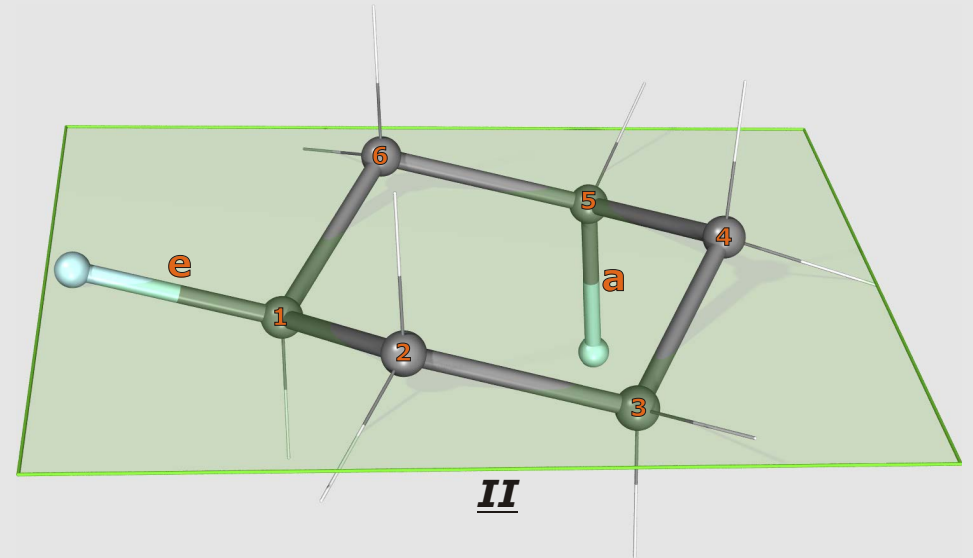


# KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA - trans-1,3 DI-FLUOR-CIKLOHEKSAN



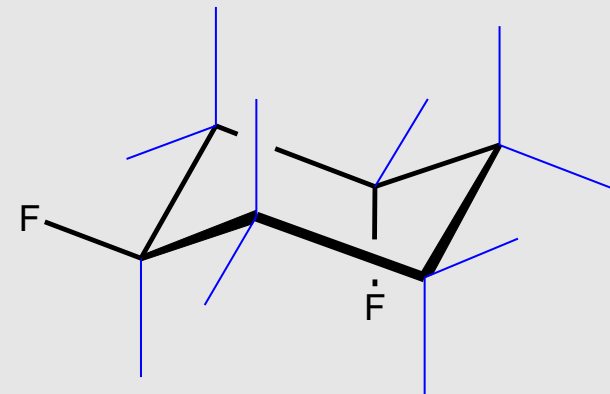
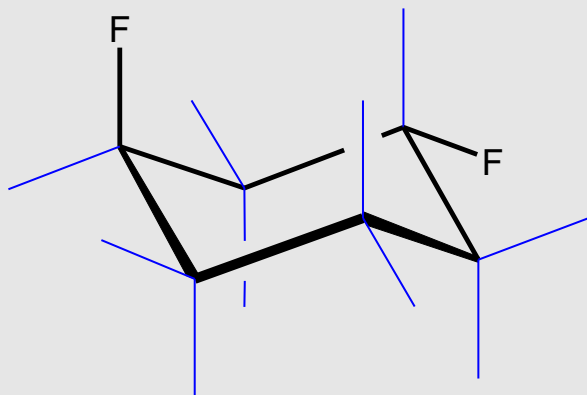
POŠTO JE KOD OBA KONFORMERA JEDAN ATOM FLUORA AKSIJALAN A DRUGI EKVATORIJALAN, SLEDI:

KONFORMER I, I II, IMAJU PODJEDNAKU STABILNOST.

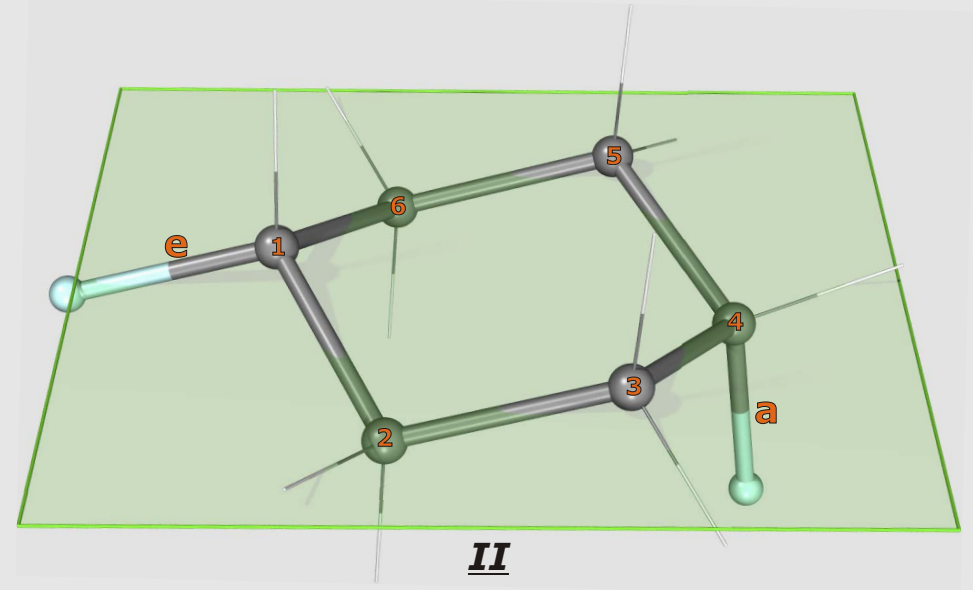
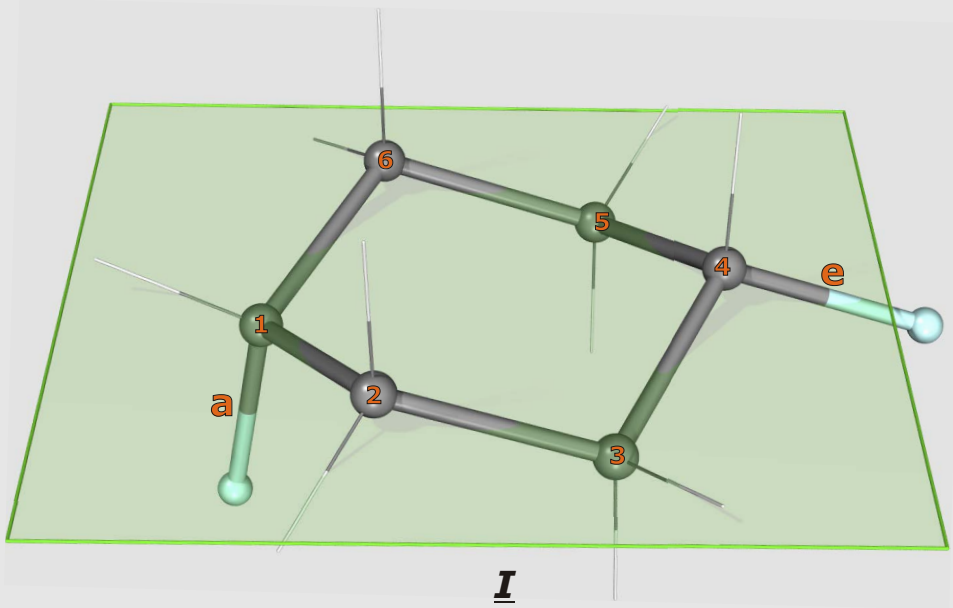


DAKLE:

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



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

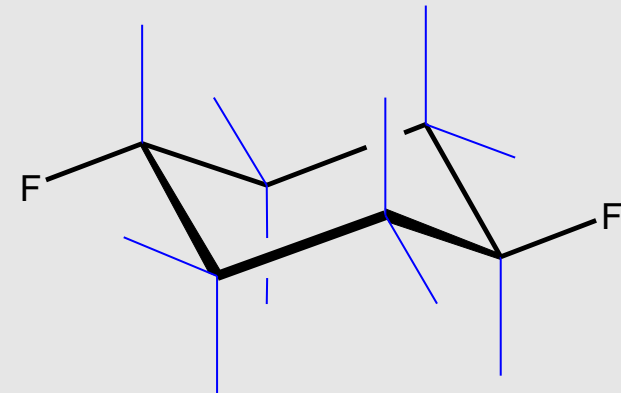
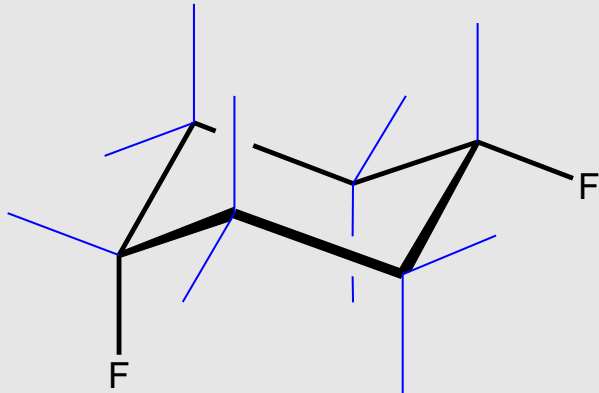


POŠTO JE KOD OBA KONFORMERA JEDAN ATOM FLUORA AKSIJALAN A DRUGI EKVATORIJALAN, SLEDI:

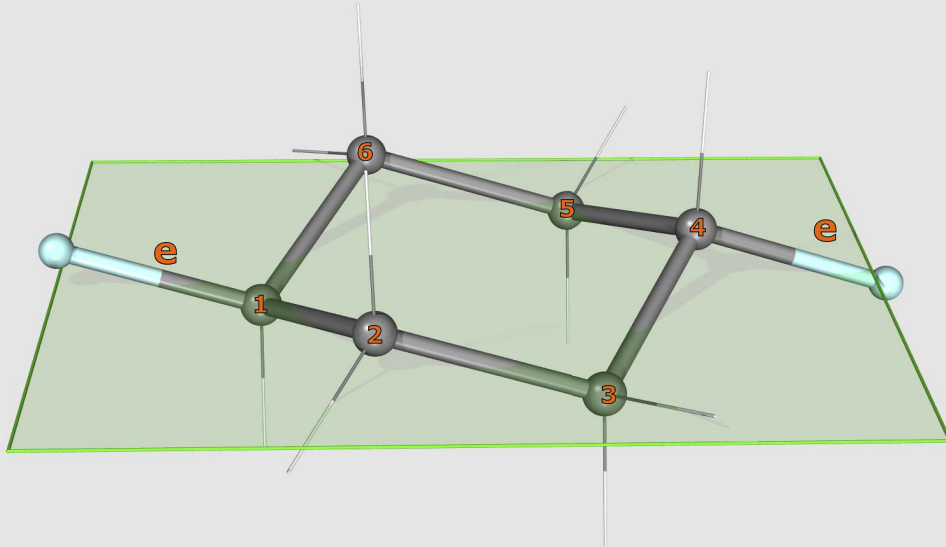
KONFORMER **I** I **II** IMAJU PODJEDNAKU STABILNOST.

DAKLE:

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



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

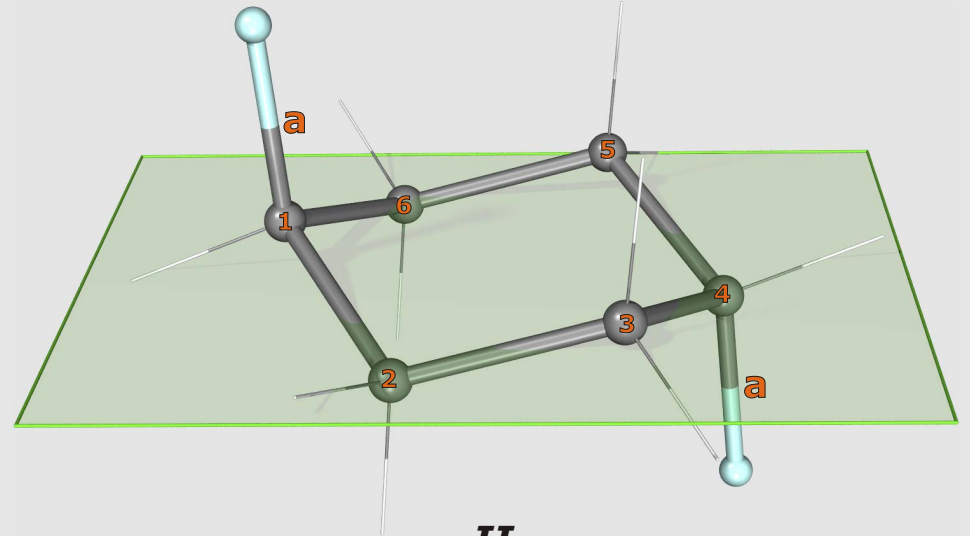


**I**

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

SLEDI:

KONFORMER **I** JE DALEKO STABILNIJI OD

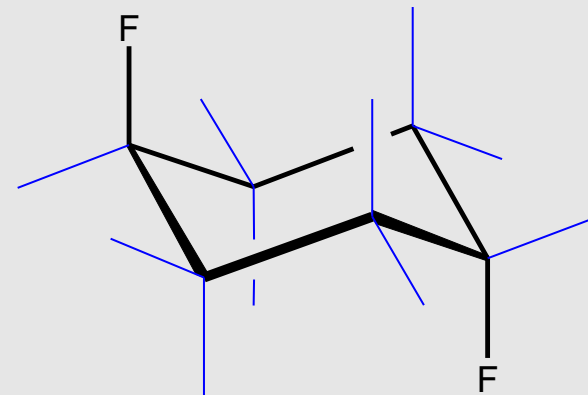
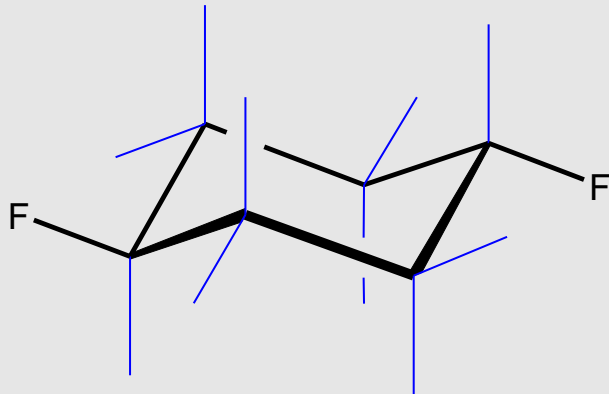


**II**

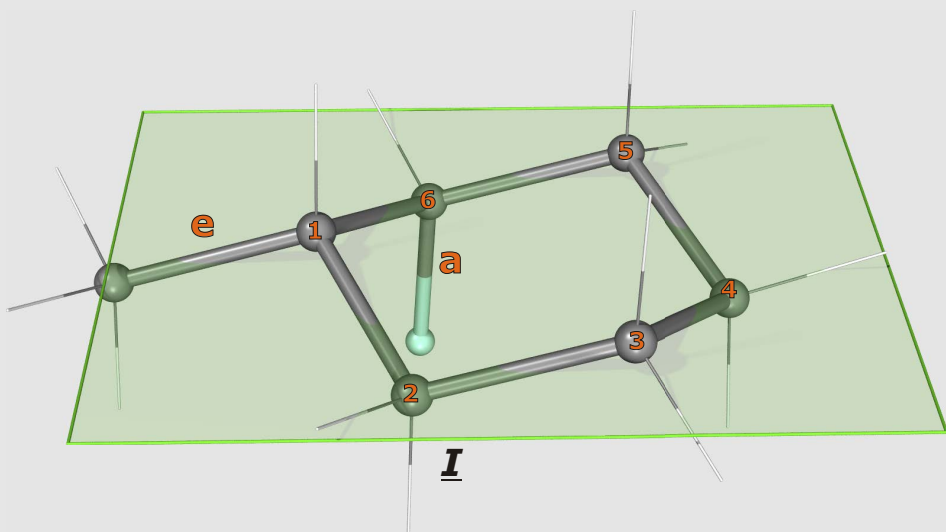
KONFORMERA **II**.

DAKLE:

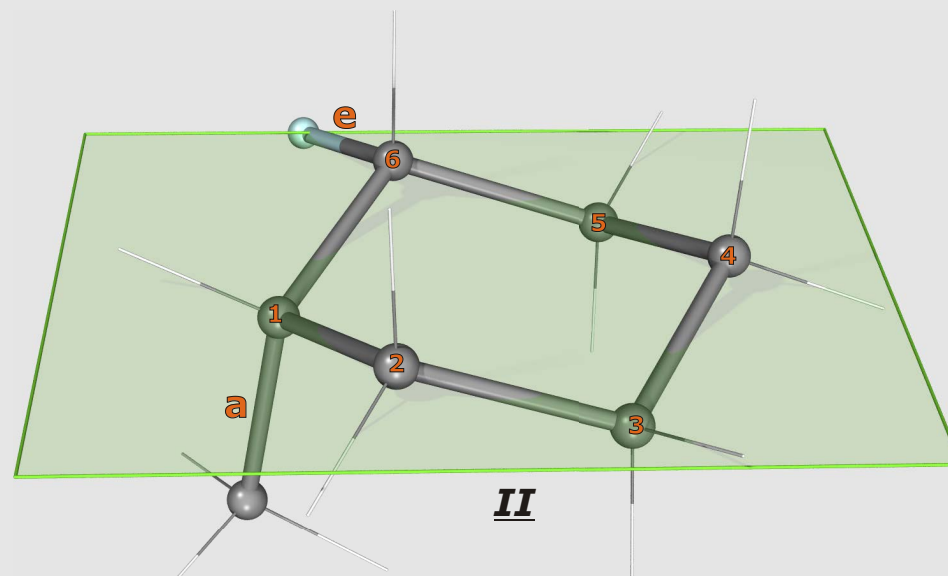
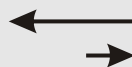
U RAVNOTEŽNOJ SMESI, KONFORMER **I** ĆE ĆE BITI DALEKO VIŠE ZASTUPLJEN OD KONFORMERA **II**.



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



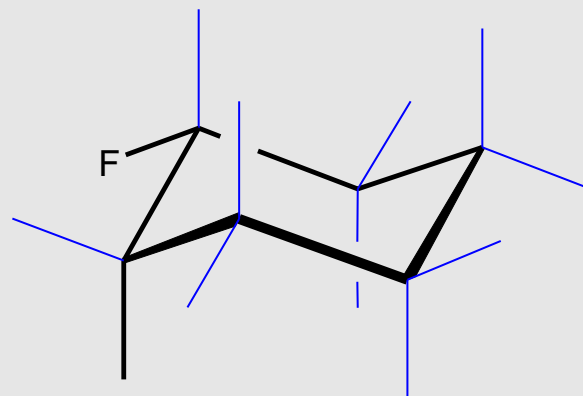
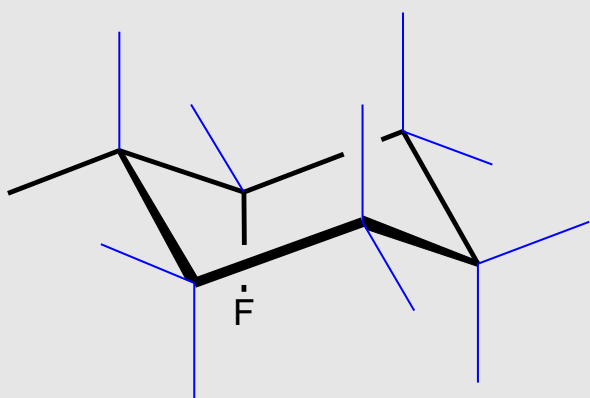
KOD KONFORMERA **I** METIL GRUPA JE EKVATORIJALANA, A FLUOR AKSIJALNI. KOD KONFORMERA **II** JE OBRNUTO, METIL GRUPA JE AKSIJALNA, A FLUOR EKVATORIJALNI. POŠTO JE METIL GRUPA VOLUMINOZNIJA OD ATOMA



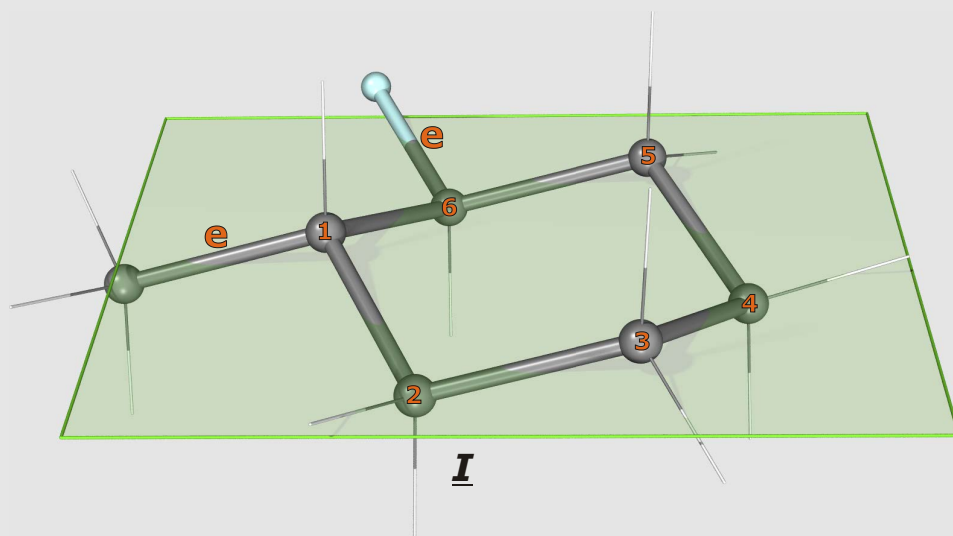
FLUORA, KONFORMER **I** JE STABILNIJI OD KONFORMERA **II**.

DAKLE:

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

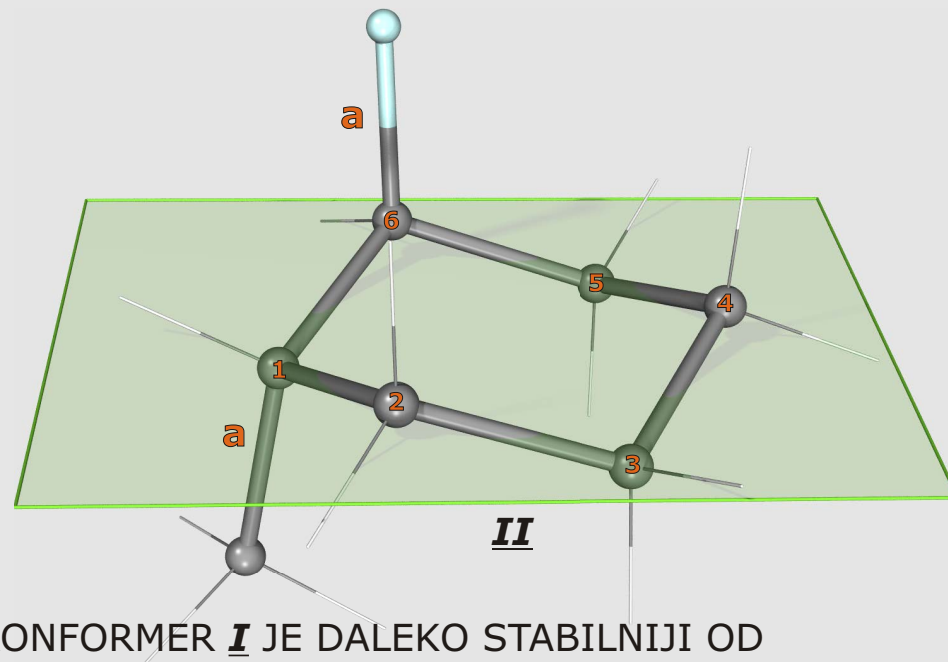
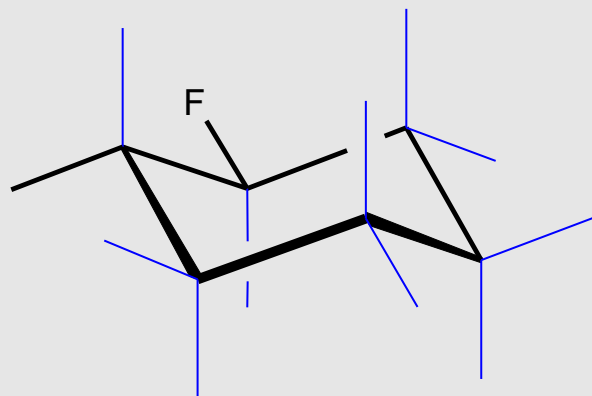


# KONFORMACIJE DI-SUPSTITUISANIH CIKLOHEKSANA: *trans*-1-METIL-2-FLUOR-CIKLOHEKSAN



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

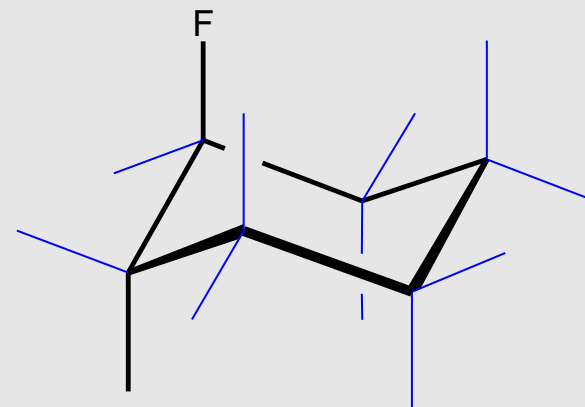
SLEDI:



KONFORMER **I** JE DALEKO STABILNIJI OD KONFORMERA **II**.

DAKLE:

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



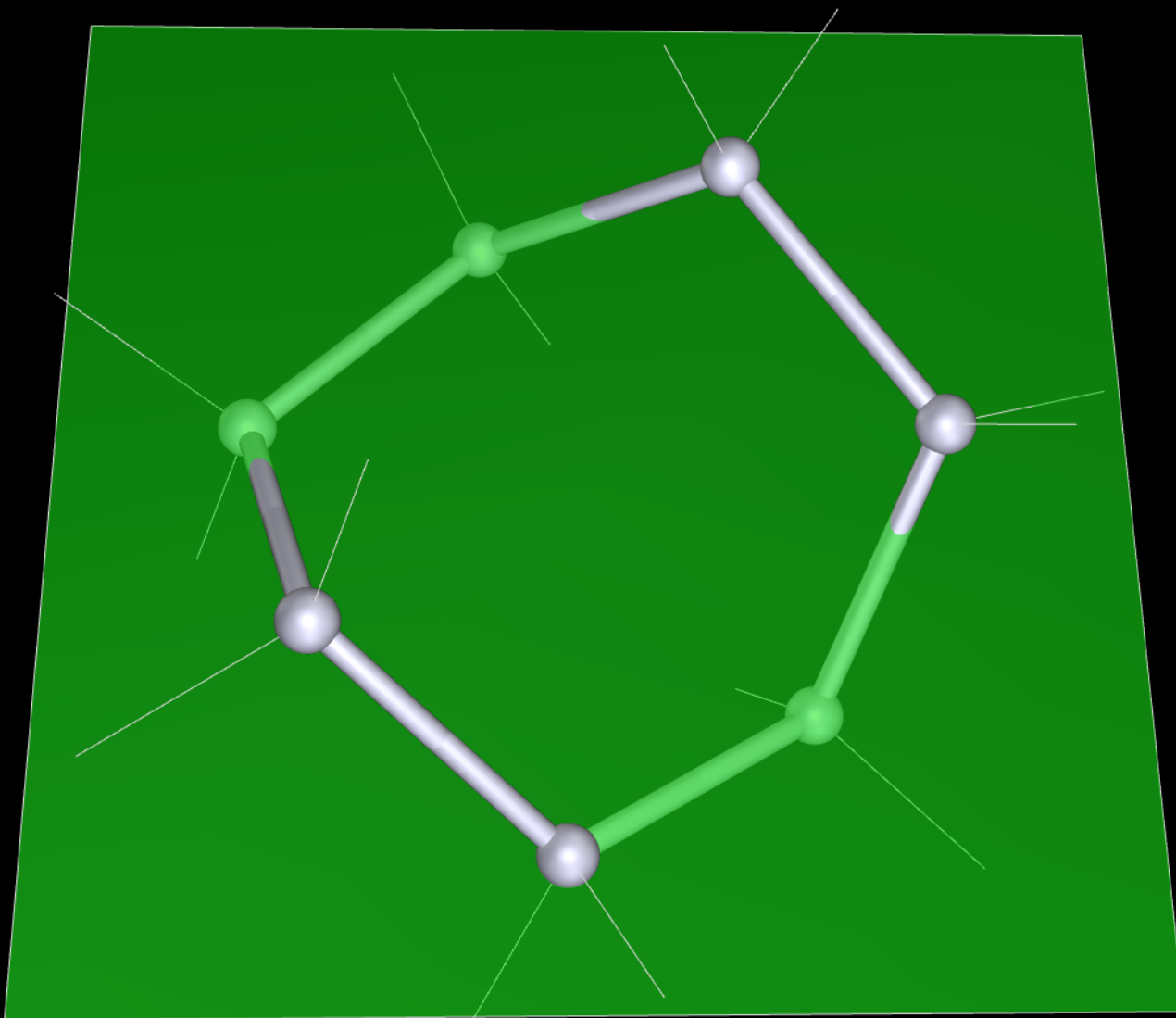
## KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA (SAMO INFORMATIVNO)

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.



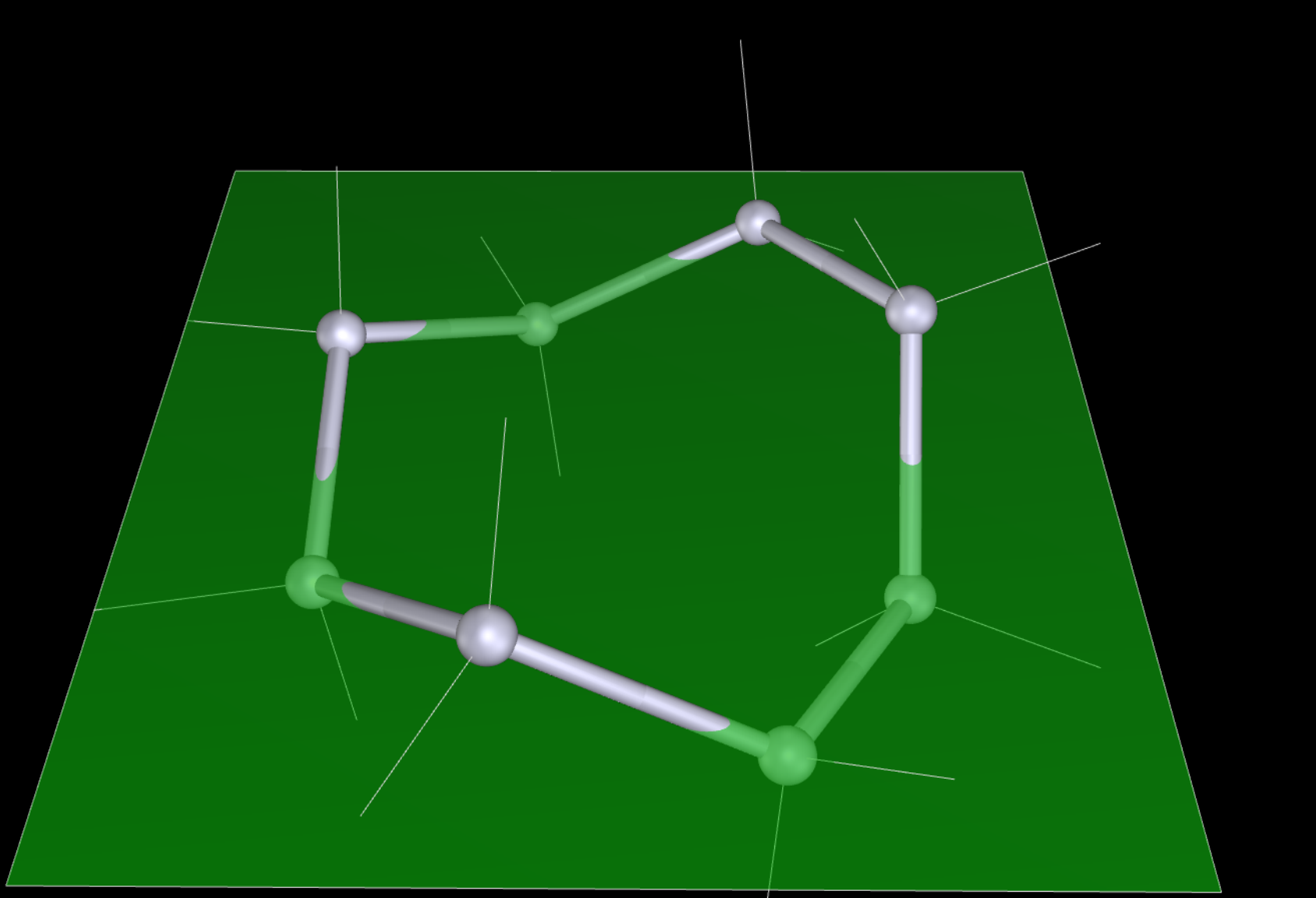
## KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA (SAMO INFORMATIVNO)

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.)



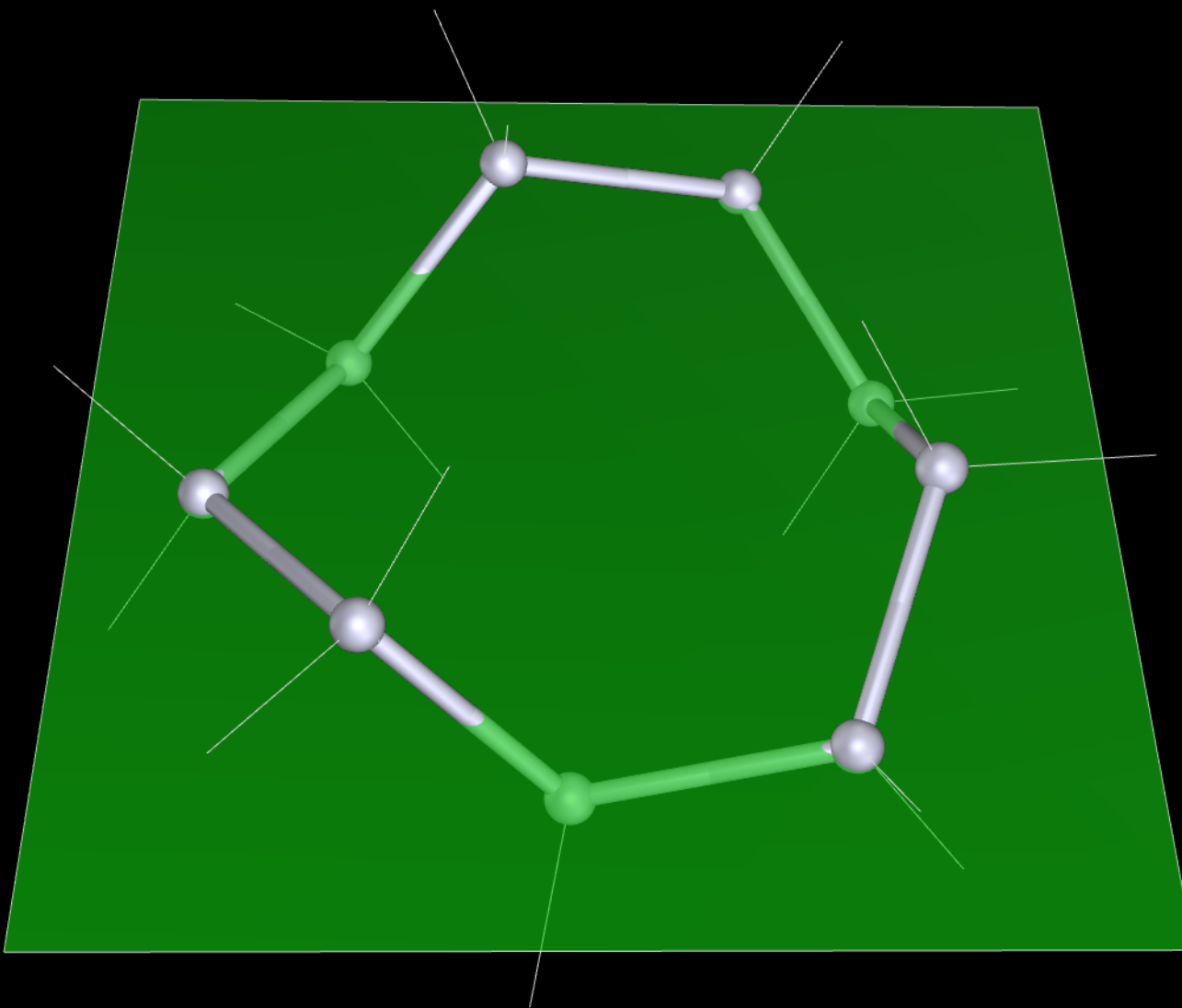
## KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA (SAMO INFORMATIVNO)

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.



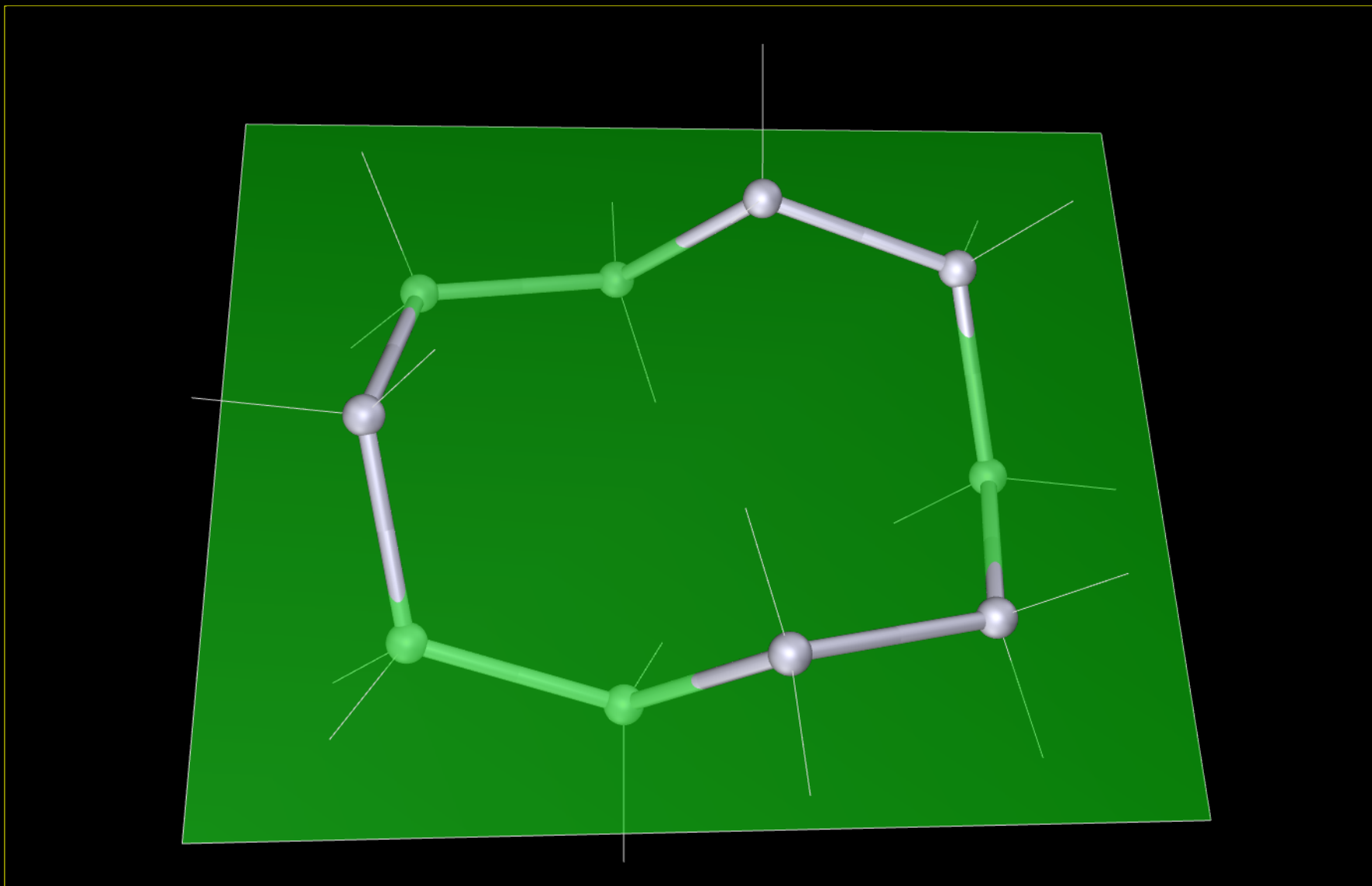
## KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA (SAMO INFORMATIVNO)

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.



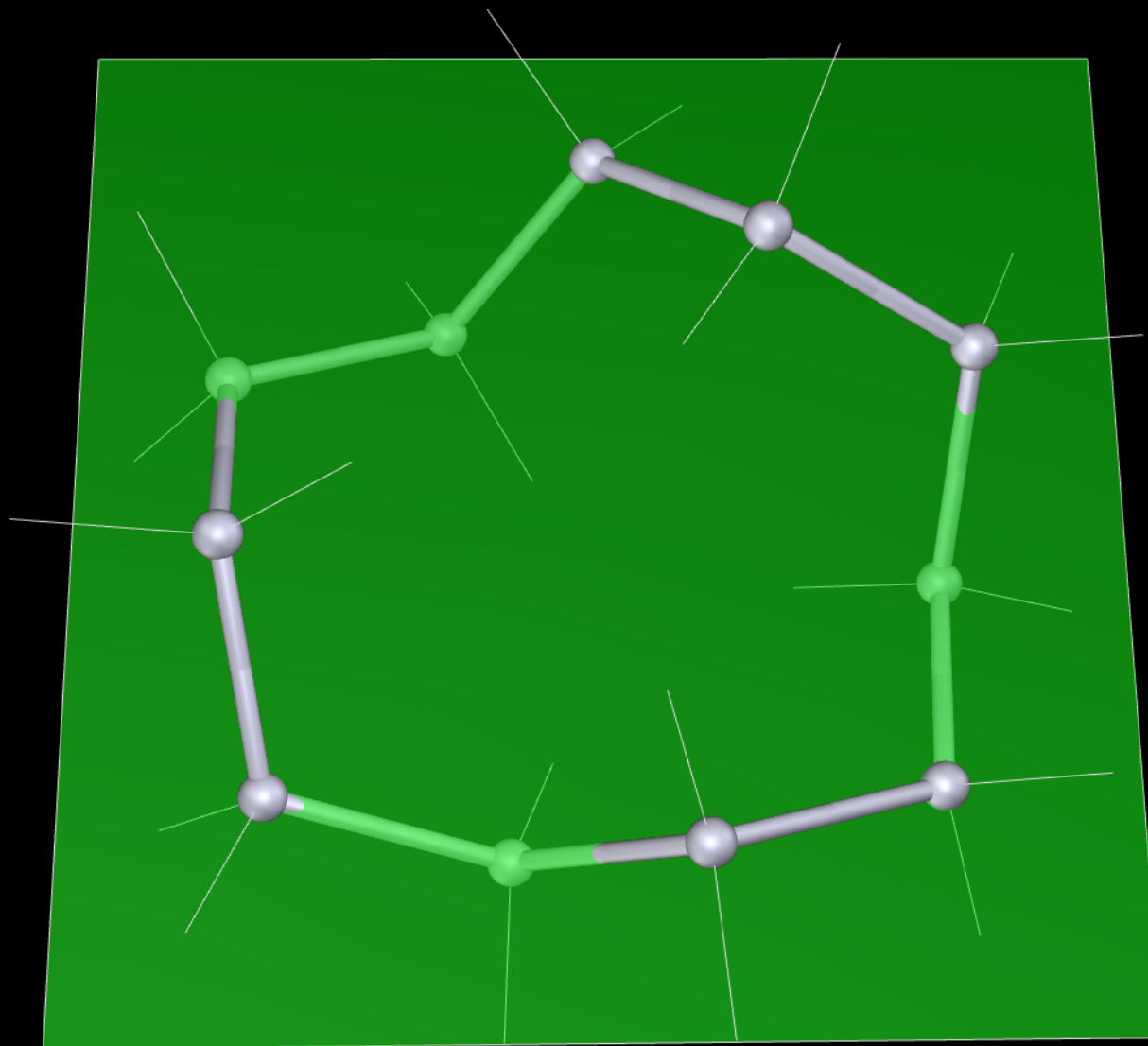
## KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA (SAMO INFORMATIVNO)

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.



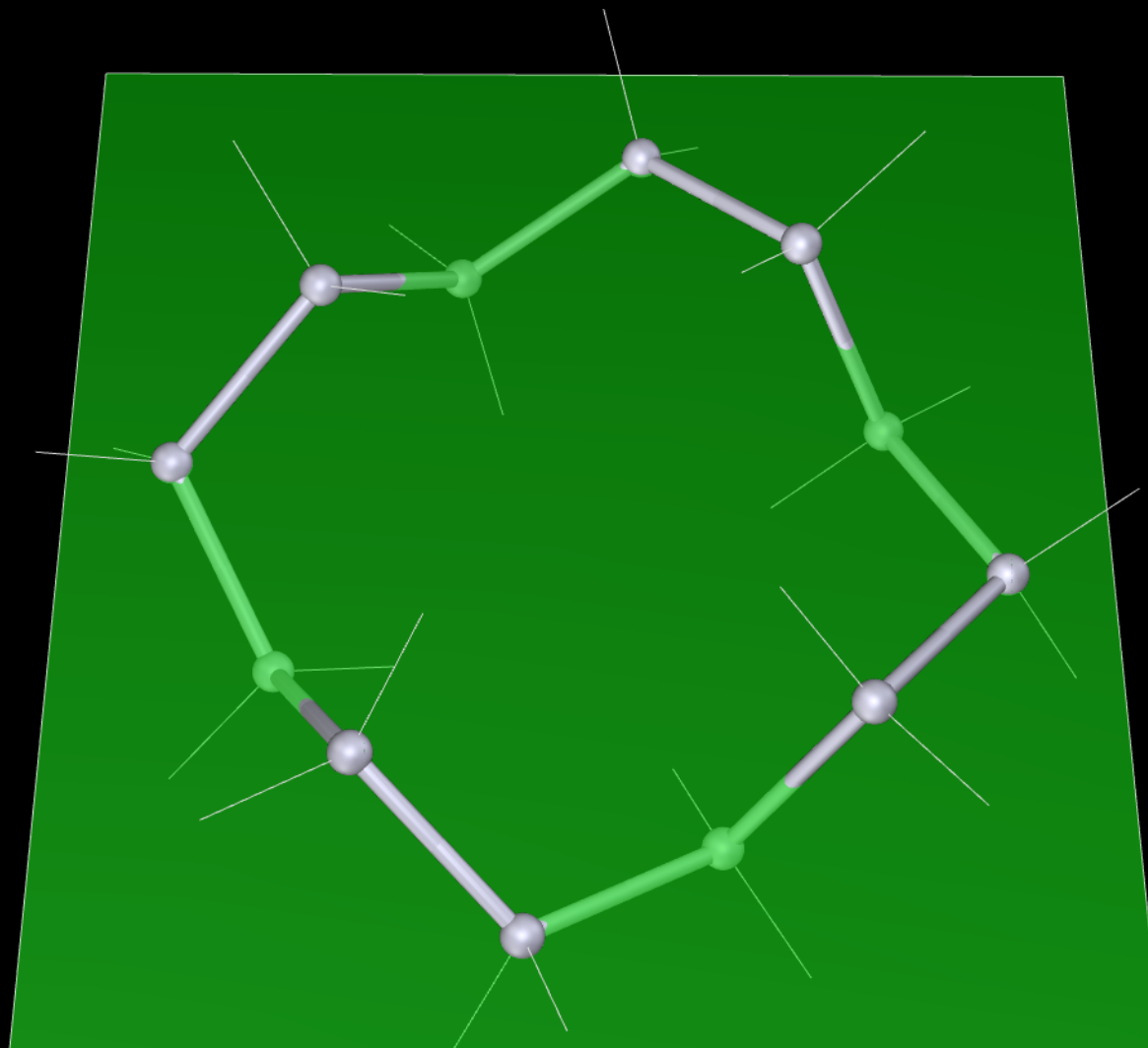
## KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA (SAMO INFORMATIVNO)

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.



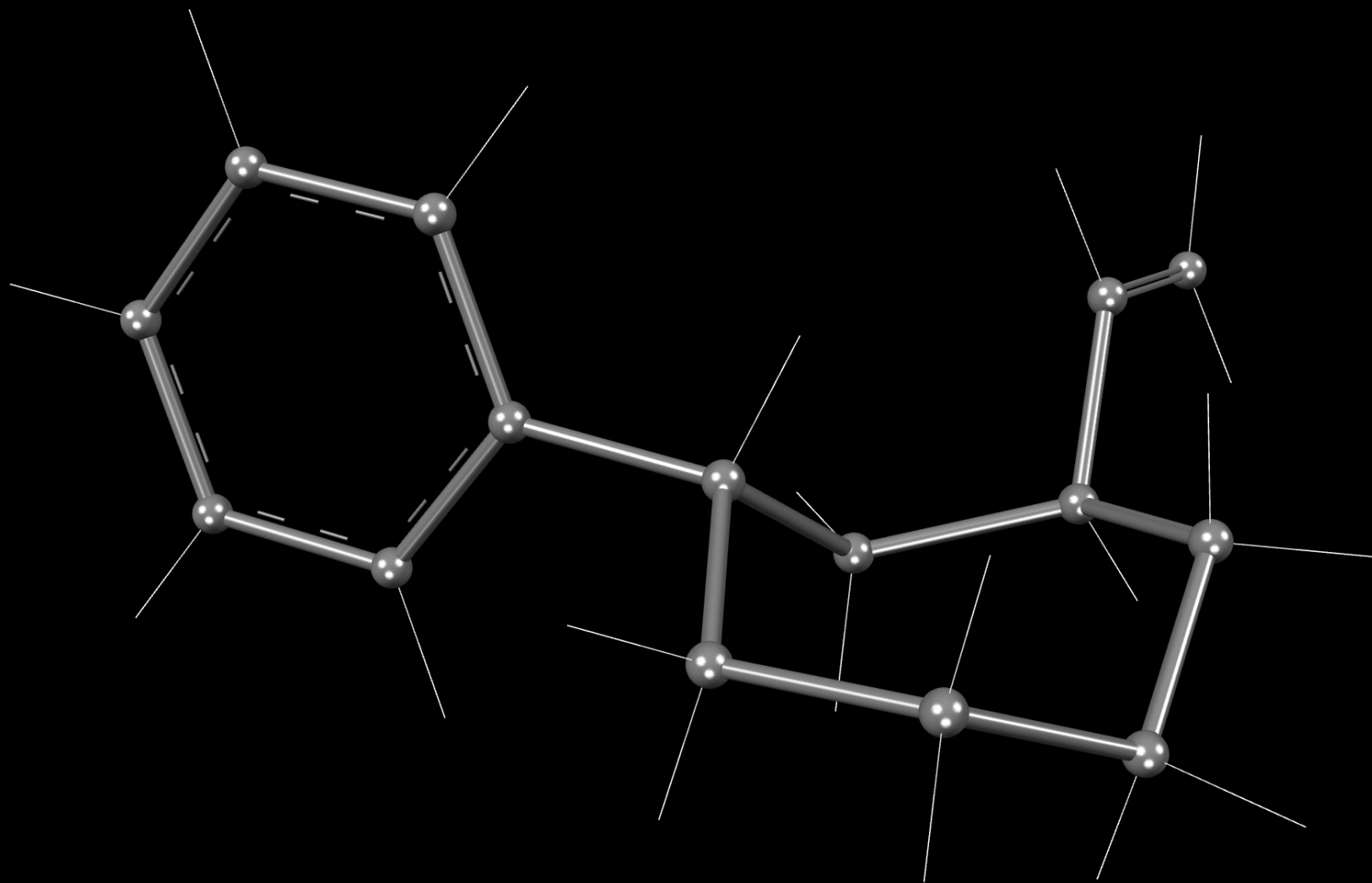
## KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA (SAMO INFORMATIVNO)

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).



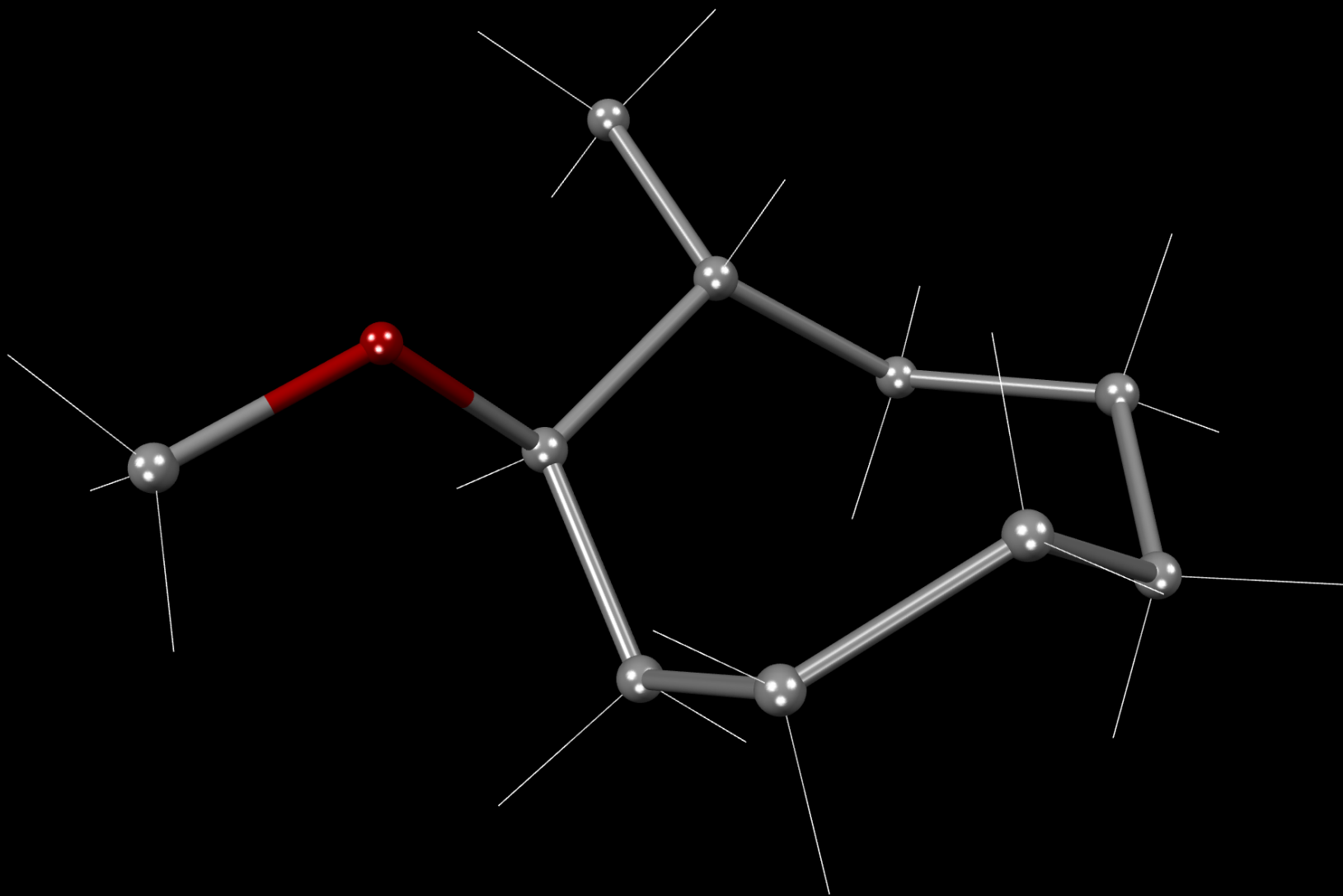
## KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA - DODATNI PRIMERI (SAMO INFORMATIVNO)

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)

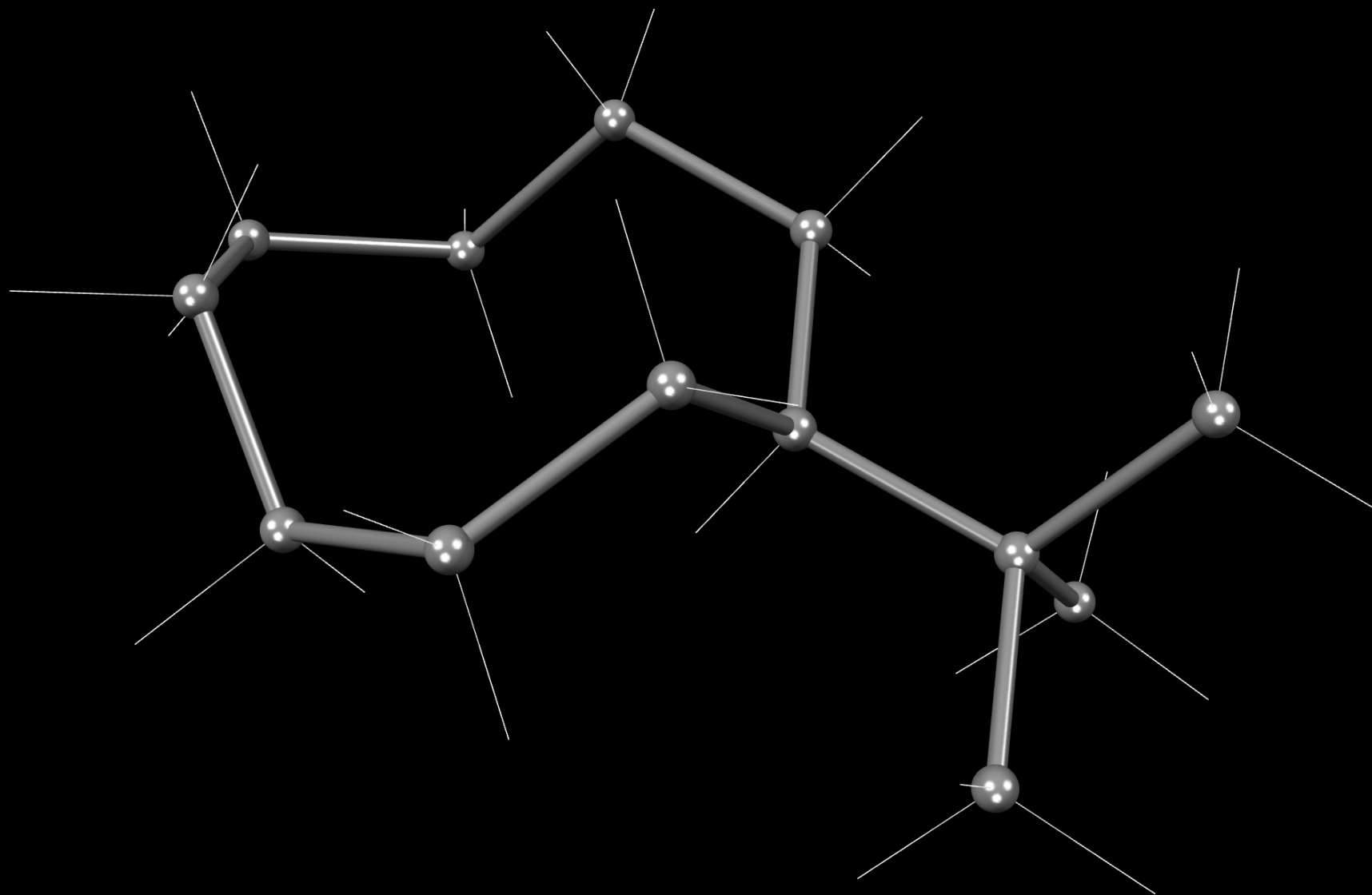
Primeri prikazuju pojedine proračunate, relativno stabilne konformacije supstituisanih prstenova sa 7-12 C atoma. U priloženim fajlovima (C7\_animacija.dsv do C12\_animacija.dsv) nalazi se grupisan veći broj različitih, proračunatih konformacija, za svaki prikazani molekul. Ove konformacije mogu se reprodukovati kao animacija i predstavljaju grubu aproksimaciju kontinualne promene konformacije molekula u gasnoj ili tečnoj fazi.





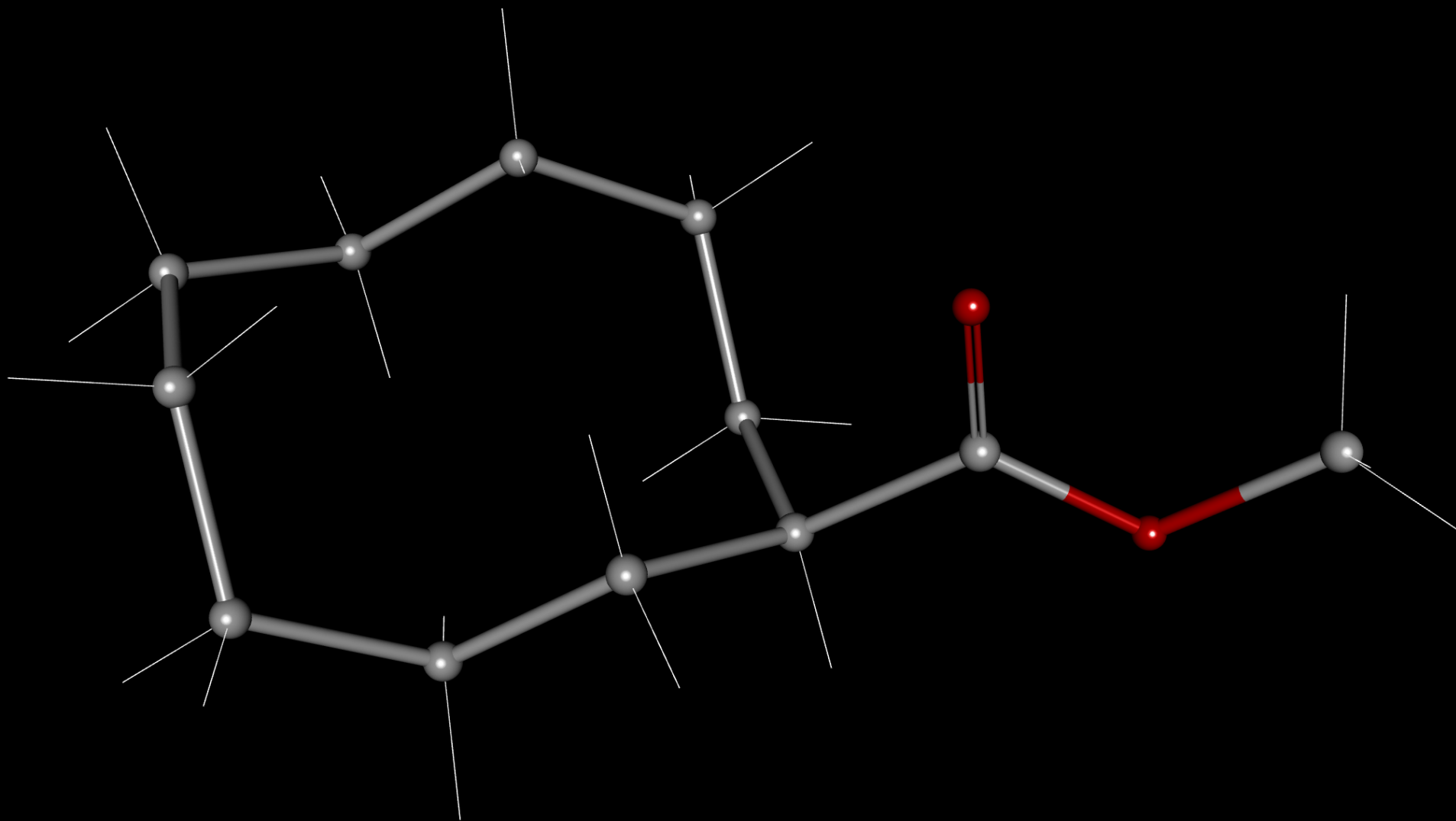
## KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA - DODATNI PRIMERI (SAMO INFORMATIVNO)

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.



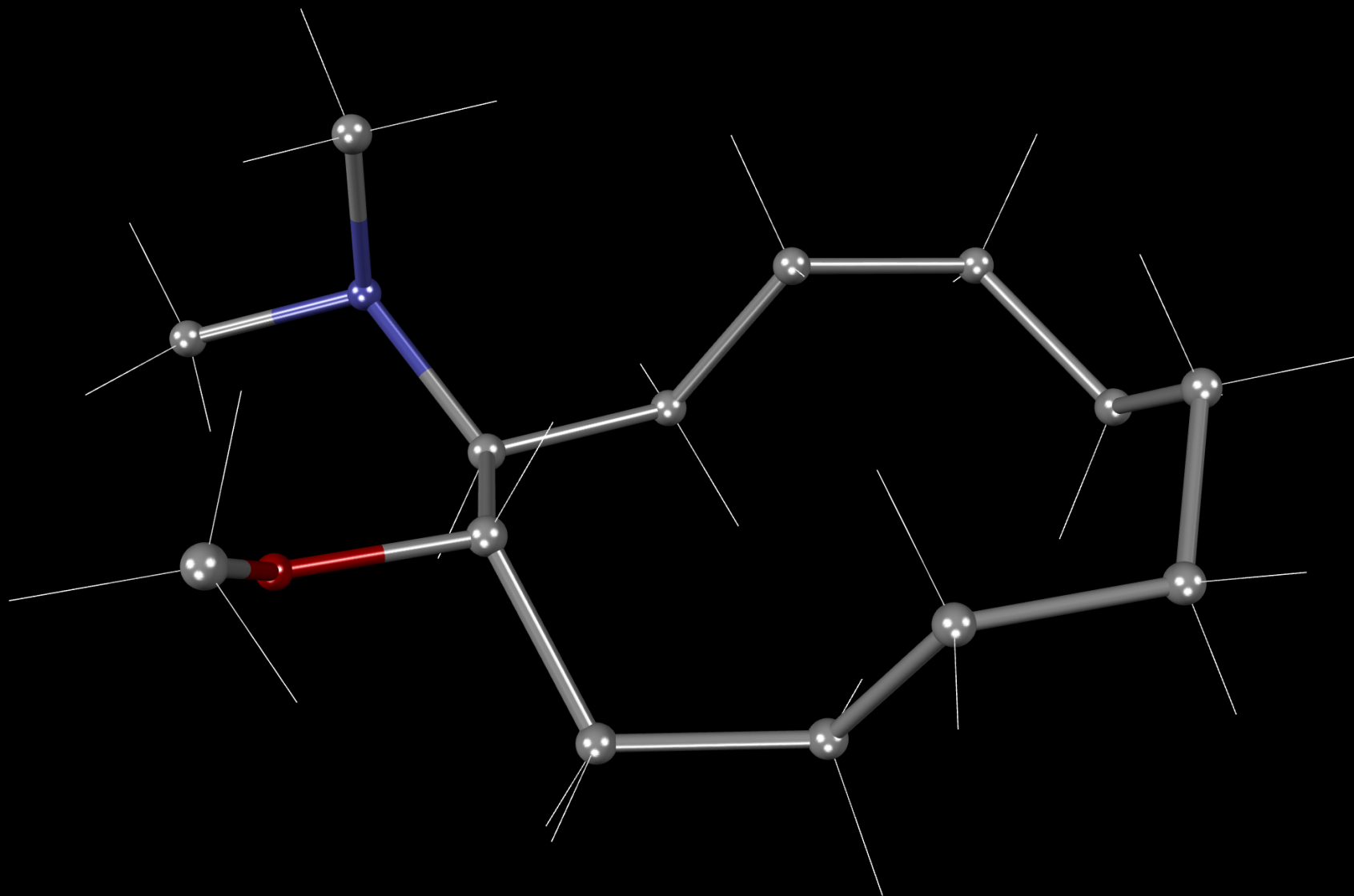
## KONFORMACIJE VEĆIH PRSTENOVA: 7-12 C ATOMA - DODATNI PRIMERI (SAMO INFORMATIVNO)

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.

