

Vorlesung Physikalisch-Organische und Supramolekulare Chemie

Prof. Dr. Christoph A. Schalley

Quickie Nr. 8:

Wiederholen Sie die Potentialenergieflächen für die Konformationsgleichgewichte von Ethan und die Rotation um die zentrale C-C-Bindung im Butan. Wie hoch sind die Barrieren? Zeigen Sie mit Hilfe von MO-Betrachtungen, dass als Ursache für die Rotationsbarriere des Ethans neben sterischen auch elektronische Gründe in Frage kommen!

Take another look at the potential-energy surfaces for the conformer equilibria of ethane and the rotation along the central C-C bond in butane. How high are the activation energies? Demonstrate by using MO considerations that electronic reasons may contribute to the rotational barrier in ethane besides steric effects!

Literature: P. Schreiner, *Angew. Chem.* **2002**, *114*, 3729-3731; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2002**, *41*, 3579-3582.