

Теория, по которой молекула циклопропана должна быть напряжённой, так как углы между связями С-С-С в них не соответствует нормальному тетраэдрическому углу  $109^{\circ}28'$ , была сформулирована Байером в 1885 году и носит название «байеровской».

В циклобутане один из атомов углерода отклоняется от плоскости трёх других атомов углерода и молекула существует в виде гибких конформаций, которые осциллируют между одной крайней конформацией и её обращённой формой:

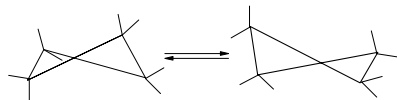


Рис. 8.2. Гибкие конформации циклобутана

В средних конформациях проявляется торсионное напряжение, связанное с отталкиванием электронных облаков водородных атомов, связанных с соседними атомами углерода. Это напряжение называется «питцеровским» по имени автора.

**Циклопентан.** Плоское циклическое расположение пяти атомов углерода будет характеризоваться внутренними углами связей  $108^{\circ}$  (1,88 рад), лишь незначительно отклоняющимися от тетраэдрического угла [угловое напряжение  $0^{\circ}44'$  (0,013 рад)].

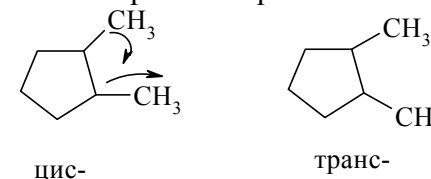


Рис. 8.3. Конформации циклопентана: а - конверт; б - полукресло.

В этом случае перекрытие орбиталей может быть почти максимальным для плоского цикла алкана. Однако ожидаемое плоскостное строение не реализуется: циклопентан имеет структуру деформированного кольца. Искажение кольца в действительности приводит к более устойчивой молекуле, поскольку оно уменьшает заслоненные

отталкивания, имеющиеся между соседними и диагональными орбиталями связей С-Н с одной и той же стороны плоского кольца. Увеличение стабильности оценивается приблизительно 5 ккал/моль ( $20,9 \cdot 10^3$  Дж/моль). Как и для случая циклобутана, атомы углерода кольца осциллируют, так что молекула может принять две более устойчивые конформации, так называемые «конверт» и «полукресло» (рис.8.3). В конформации конверта четыре атома углерода копланарны, в то время как в конформации полукресла лишь три атома находятся в одной плоскости, а из двух других один расположен выше, а другой — ниже этой плоскости.

Согласно основному положению конформационного анализа — принципу минимального отталкивающего взаимодействия несвязанных атомов — энергия взаимодействия атомов боковых заместителей (в углеводородах это атомы Н в замещающих радикалах) является основным фактором, определяющим относительную термодинамическую устойчивость стереоизомеров:



В *цис*-изомере 1,2-диметилциклопентана наблюдается перекрытие ван-дер-ваальсовских радиусов алкильных заместителей, а в *транс*-изомере — нет.

1,3-Дизамещённые циклопентаны также существуют в виде двух пространственных изомеров: *цис*- и *транс*-. В обоих изомерах отсутствуют взаимодействия несвязанных между собой атомов, поэтому термодинамическая устойчивость этих изомеров практически одинакова:

