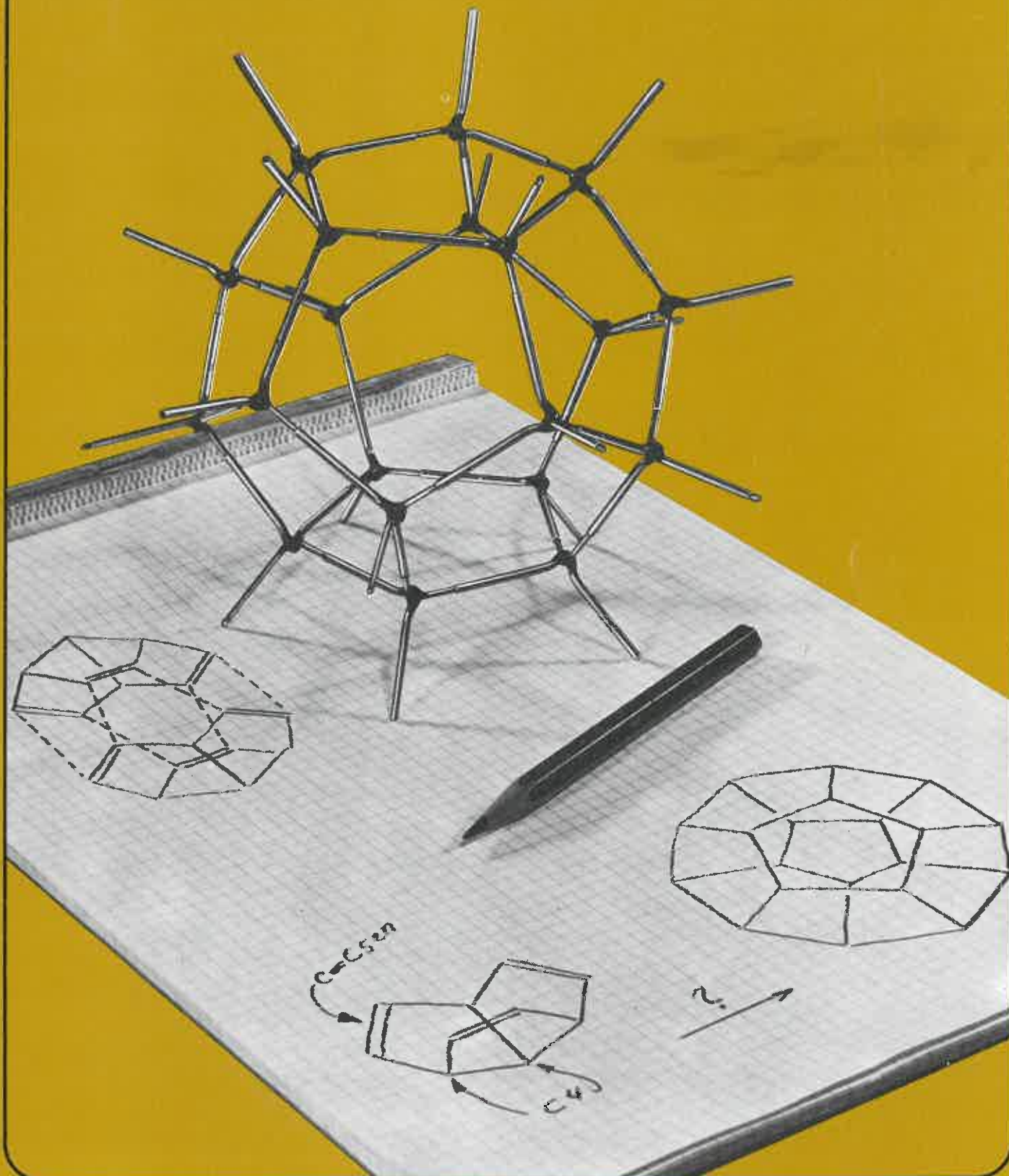


BÜCHI

DREIDING STEREOMODELS



BÜCHI LABORATORIUMS-TECHNIK AG
CH-9230 FLAWIL/SCHWEIZ / 071 83 13 92 TELEX 77403

Description des Stéréomodèles

1. Principe

Les Stéréomodèles sont des modèles moléculaires d'un genre nouveau, particulièrement adaptés aux problèmes de la stéréochimie et aux études des mécanismes de réaction. Les unités consistent en tiges et tubes soudés en un point central représentant un noyau atomique. Les tiges et les tubes correspondent exactement, et par leur nombre et par leur emplacement, aux liaisons sigma partant du noyau atomique de l'élément considéré: C, O, N, etc. Leur

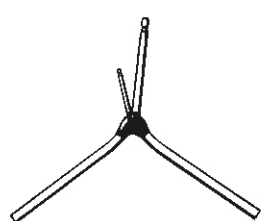
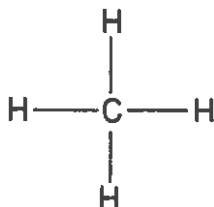


fig. 1



longueur est proportionnelle à la distance séparant un atome d'hydrogène du noyau central de l'élément auquel il est rattaché (0,4 Å/cm). L'extrémité libre d'une tige ou d'un tube idéalise par conséquent l'emplacement du noyau d'un atome d'hydrogène, (voir fig. 1) et chaque unité est le modèle stéréométrique d'une série homologue de molécules simples: CH₄, H₂O, NH₃, etc.

Ces unités peuvent être assemblées en modèles plus compliqués; pour cela il suffit d'introduire la tige d'une unité dans le tube d'une deuxième unité. Un arrêt dans les tubes empêche les tiges de pénétrer plus avant qu'elles ne devraient le faire pour respecter la proportionnalité (0,4 Å/cm ou 2,5 cm/Å) des distances entre atomes. Deux liaisons

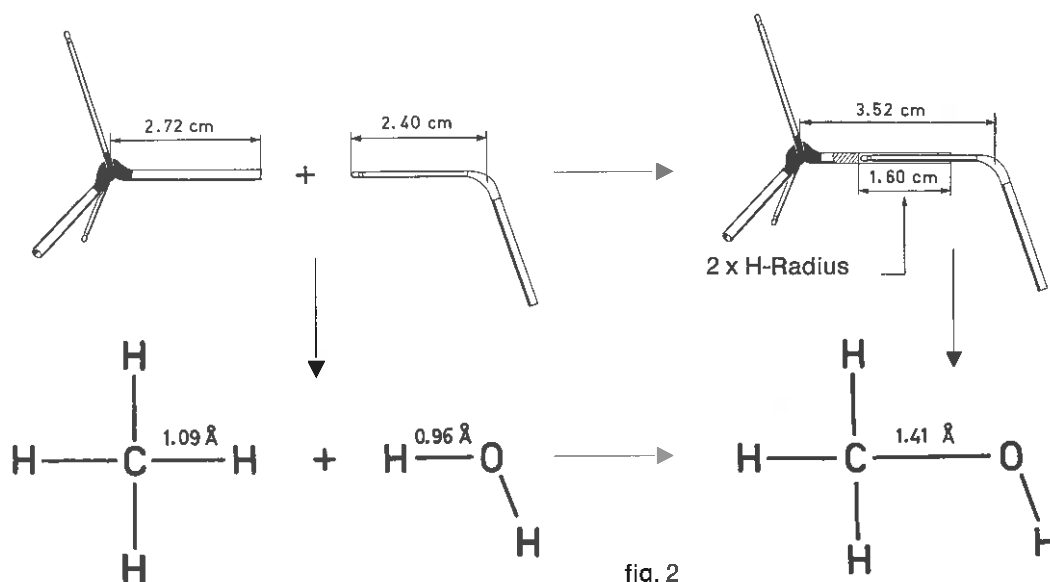


fig. 2

C—H donnent ainsi naissance à une liaison C—C, deux liaisons C—H et H—O à une liaison C—O (voir fig. 2), deux liaisons C—H et H—N à une liaison C—N, etc. Le fait d'introduire la tige d'une première unité dans le tube d'une seconde ou inversement n'influence en rien la liaison qui prend naissance, les unités sont ainsi construites que la distance dans les deux cas reste la même. Pendant l'assemblage deux atomes d'hydrogène disparaissent*. Cette construction selon le principe d'une «synthèse deshydrogénante» repose sur le principe de l'additivité des rayons atomiques covalents.

L'assemblage tige-tube est maintenu en place par un système d'encastrement qui permet toutefois une libre rotation de la tige dans le tube (voir fig. 3). L'assemblage de deux ou de plusieurs unités constitue un tout solide, inca-



fig. 3

pable de dislocation. Un modèle construit d'après le principe ci-dessus représente exactement, et à l'échelle, une molécule avec ses liaisons, ses angles et ses distances et permet même, la rotation interne que la molécule réelle

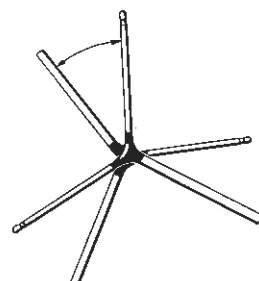


fig. 4

doit subir pour pouvoir occuper les diverses conformations qu'elle possède; on peut mesurer sur le modèle la distance séparant les atomes non liés ensemble et les angles de torsion (voir fig. 4) des diverses conformations, on peut en déduire l'action réciproque des atomes non liés, et étudier les éléments de symétrie existant dans la molécule.

* André S. Dreiding, Helv. Chim. Acta 42, 1399 (1959)

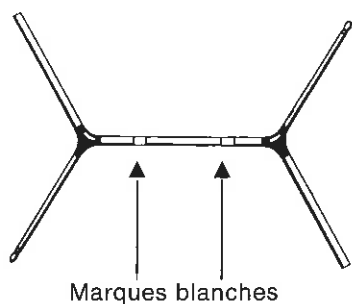


fig. 5

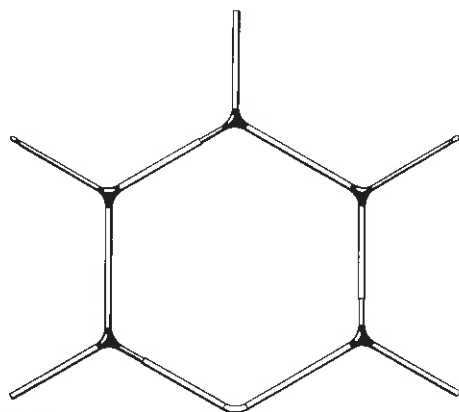
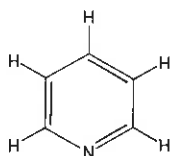


fig. 6

Lorsque les atomes doivent être rattachés par des liaisons dépourvues de rotation libre, les modèles que les représentent sont rigides et ne peuvent être décomposés en unités plus simples. Des noyaux centraux fixés à distance convenable partent, comme précédemment, les tiges et les tubes dont l'emplacement correspond à celui des liaisons réelles. Ce genre d'unité est valable pour les atomes reliés par des doubles et des triples liaisons tels que $C=C$, $C=N$, $C=O$, $C\equiv C$, etc., ainsi que pour certains cycles tels que le cyclopropane ou l'oxirane. Les noyaux benzéniques et polyaromatiques s'obtiennent par assemblage d'unités de deux carbones à double liaison, appelées doubles-liaisons aromatiques ($C=C$ ar.). Pour les hétérocycles on peut se servir d'unités simples d'hétéroatomes ou d'unités carbone-hétéroatome aromatiques (voir fig. 6). Des marques colorées, au centre du modèle, différencient les trois types de doubles-liaisons (voir fig. 5 et le paragraphe 3c).

Dans certains cas on a avantage à construire les cycles en deux temps. Dans un premier temps on ne fait qu'engager l'extrémité des tiges dans les tubes correspondants pour éviter les tensions, puis dans un deuxième temps, lorsque le modèle a pris forme, on enfonce toutes les tiges jusqu'à leur emplacement final (bruit caractéristique d'encastrement).

2. Classification suivant l'angle de tension

Dans une molécule chaque atome possède ses angles de valence caractéristiques. Lorsqu'aucune tension n'est présente, ces angles possèdent leur valeur normale, comme c'est le cas dans les molécules en chaînes libres, les cycles à six atomes, les macrocycles, etc. Les modèles d'atomes ou de groupes d'atomes à angles sans tensions sont classés dans le groupe 6, et ne font l'objet d'aucune caractérisation particulière.

Un angle de valence est déformé par tension (resserrement ou élargissement) lorsque l'atome est inclus dans un cycle dont les angles ne correspondent pas aux angles de valence normaux, ou lorsque la molécule est localement «surchargée» d'atomes (encombrement stérique).

Pour construire la majorité des molécules «tendues» il suffit d'utiliser des unités à angles resserrés (trois degrés de resserrement correspondant aux cycles à 3, 4 ou 5 atomes) ou à angles élargis (un seul degré d'élargissement correspondant à certaines chaînes et certains cycles). Les unités «tendues», qu'on ne peut reconnaître au premier

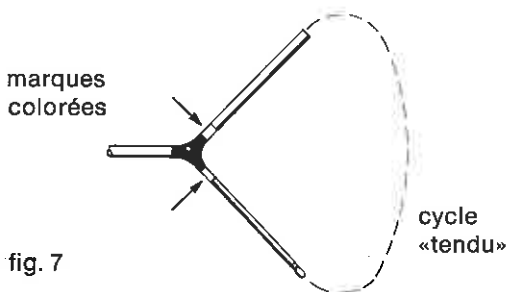


fig. 7

coup d'œil, sont codées par une couleur appliquée près du noyau central sur les liaisons «tendues» qui en partent (voir fig. 7 et le paragraphe 3b). La classification des unités en groupes est basée sur la forme du cycle, cause de tension dans la molécule (voir le tableau 1). Chacun des cinq groupes 3, 4, 5, 6 et 7 est divisé en 3 sous-groupes:

- Unités de carbone,
- Unités de carbone et d'hétéroatomes,
- Unités d'hétéroatomes.

Les groupes 1 et 2 renferment les unités accessoires et les modèles complets ou déjà assemblés.

Tableau 1 Classification des Stéréomodèles

Groupe No.	Désignation	Degré de tension	Description	Marque colorées selon l'angle de tension
1	Unités accessoires	—	Unités accessoires ne représentant pas des molécules (voir la liste corresp. para. 6)	—
2	Modèles complets ou déjà assemblés	—	Modèles de grande taille déjà assemblés ou solidement montés que n'ont pu être inclus dans les groupes 3 à 7	—
3*	Cycles à 3 atomes	Angle fortement resserré	Cycle formant une seule unité	—
4*	Cycles à 4 atomes	Angle resserré (90° env.)	Unités analogues	rose
5*	Cycles à 5 atomes	Angle légèrement resserré (108° env.)		blanche
6*	Chaînes et cycles à 6 atomes	pas d'angle de tension		pas de marque
7*	Certaines chaînes et cycles à 6, 7 atomes	Angle légèrement élargé (de 8 à 10° env.)		grise

*a) unités de carbone

b) unités renfermant du carbone et un hétéroatome

c) unités d'hétéroatomes

3. Marques colorées

(voir le tableau avec explications inclus dans la couverture)

a) Eléments

Les noyaux atomiques sont représentés par les points de soudure et les extrémités des tiges et des tubes. Chaque élément est alors caractérisé par une des couleurs distinctives suivantes, appliquée sur le noyau atomique correspondant:

sans couleur = H	jaune d'or = Fe	argent = Si
vert foncé = As	brun foncé = I	gris foncé = Sn
vert clair = B	bleu clair = N	blanc = Zn
rouge brun = Br	bleu foncé = Ni	olive = Se
noir = C	rouge = O	bleu vert = Mg
vert jaune = Cl	violet = P	gris brun = Mn
vert bleu = Co	gris clair = Pb	blanc bleuté = Hg
beige = F	jaune clair = S	rouge foncé = Cu

b) Classification selon l'angle de tension

L'emplacement des couleurs se trouve à la base des tiges et des tubes représentant les liaisons dont les angles sont tendus (voir fig. 7).

marque rose	=	groupe 4 (angle 90° env.)
marque blanche	=	groupe 5 (angle 105° env.)
pas de marque	=	groupe 6 (angle selon la coordination et l'hybridation)
marque grise	=	groupe 7 (angle écarté de 8 à 10°)

Les unités des autres groupes ne sont pas marquées, leur emplacement découlant d'une manière évidente de leur structure.

c) Classification des différents types de doubles liaisons

Les trois types de doubles liaisons sont différenciés par des marques colorées placées au centre des liaisons correspondantes (voir fig. 5).

une marque blanche	=	double liaison isolée
deux marques blanches	=	double liaison conjuguée (voir fig. 5)
pas de marque	=	double liaison aromatique (voir fig. 6)

4. Symboles

Les différents symboles des stéréomodèles ont été choisis en fonction de l'atome représenté (symbole chimique) et de ses propriétés géométriques dans l'espace (liaisons, indices de coordination, angle de tension, etc.).

tirets:	Nombre de liaisons effectives ou potentielles
.....4	(chiffre au-dessus de la ligne) indice de coordination
.....2	(chiffre en dessous de la ligne) nombre d'atomes identiques dans une unité
.....5	(chiffre à la hauteur de la ligne) classification (selon l'angle de tension, voir paragraphe 2).

ar	=	aromatique
con	=	conjugué
en	=	endocyclique
ex	=	exocyclique
cycl	=	structure cyclique
pl	=	plan
lin	=	linéaire
tr	=	trans
cis	=	cis
frot	=	rotation libre
*	=	unité dans laquelle une ou plusieurs tiges ont été remplacées par des tubes

Exemples:

C ⁴	=	carbone avec 4 substituants localisés sur les sommets d'un tétraèdre
C ³ 7con	=	carbone avec 3 substituants localisés trigonalement, faisant partie d'un cycle à 7 atomes, conjugué
C=N—5en	=	groupement imine dont les 2 atomes (C et N) font partie d'un cycle à 5 atomes
C=N=5Nex	=	groupe imonium dont l'azote est inclus par l'intermédiaire des deux autres substituants dans un cycle à 5 atomes
cyclC ₃	=	3 carbones tétraédriques dans un cycle (cyclopropane)
cycl [C ³] ₇	=	7 carbones (trigonaux) dans un cycle plan (ion tropylium)
C=Cconfrot	=	double liaison conjuguée, à rotation libre, pour l'étude de la conformation des oléfines

5. Applications

- Etude des problèmes stéréochimiques
- Analyses d'isomérisation
- Etude des éléments de symétrie
- Analyse de la conformation (étude des problèmes énergétiques)
- Analyse des relations dynamiques
- Etude des mécanismes de réaction par représentations approximatives des états de transition
- Empêchements stériques
- Analyse des spécificités stéréométriques contrôlées par la symétrie des orbitales
- Interprétation des constantes de couplage et de l'effet des champs magnétiques dans les spectres de résonance magnétique nucléaire
- Analyse selon les règles des effets chiroptiques (pouvoir rotatoire ou dichroïsme circulaire)
- Spécification de chiralité et d'hélicisme

6. Accessoires

Les unités accessoires (groupe 1) facilitent et étendent l'emploi des stéréomodèles:

- a) La **réglette graduée** (code: ANGSTROMSCALA) permet une mesure rapide des distances en Ångströms (voir photo fig. 8). Il suffit pour cela d'introduire la tige ou le tube dans le trou creusé à cet effet au point zéro de l'échelle et de lire ensuite directement la distance à l'endroit considéré.
- b) Torsiometer, destiné à mesurer la valeur des angles de torsion (voir photo fig. 9).
- c) Les **plaquettes demi-cercles van der Waals** (selon le Prof. E. C. Kooyman) (code: H-VAN DER WAALS) sont ajustées aux extrémités des tubes ou des tiges et par rotation délimitent l'espace van der Waals diminué de 20% d'un atome d'hydrogène. Ces plaquettes permettent de concrétiser l'encombrement vrai de la molécule dans l'espace et associent à l'étude stéréométrique, seule permise par les liaisons atomiques, une étude de l'encombrement spécial tel qu'il résulte des rayons van der Waals (voir photo fig. 10). De plus l'emploi de demi-cercles présente sur les calottes l'avantage de pouvoir construire des modèles très encombrés impossibles à réaliser autrement [E. C. Kooyman, J. Chem. Ed. **40**, 204 (1963)].

- d) Les **ressorts de friction** (code: ROTORESISTOR) freinent la libre rotation des liaisons simples, ce qui permet d'obtenir un modèle dans n'importe quelle conformation. L'étude de ce modèle et ses mesures en sont grandement facilitées (voir photo fig. 11).
- e) Les **unités d'extension** (selon Sir E. R. H. Jones) doublent les dimensions des molécules de carbures d'hydrogène et facilitent les démonstration (code: C-EXTENSION, H-EXTENSION).
- f) Les **plneces à encastrer** (code: FIXPLIERS) sont destinées à renforcer le système d'encastrement (voir photo fig. 12).

7. Unités accessoires

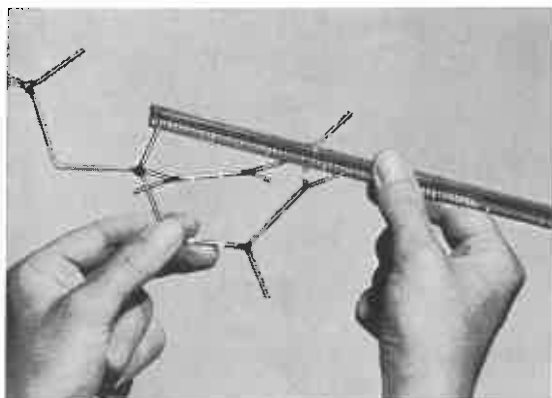


fig. 8 Mode d'emploi de la règle graduée «Angstromscala»

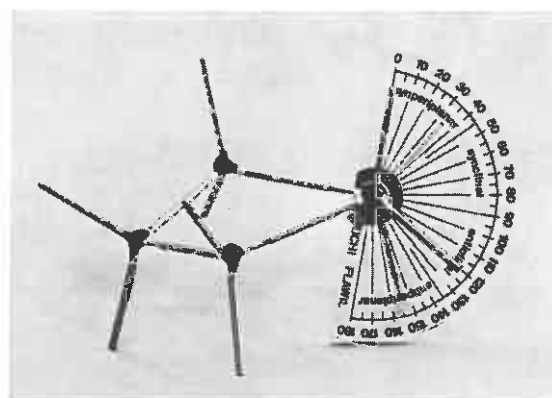


fig. 9 Mesurement d'angles de torsion

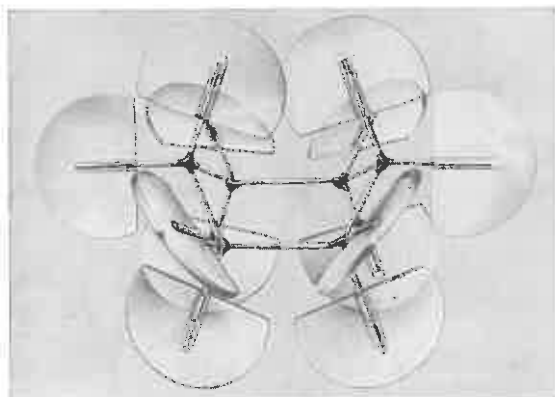


fig. 10 Plaquettes demi-cercles van der Waals (selon E. C. Kooyman)

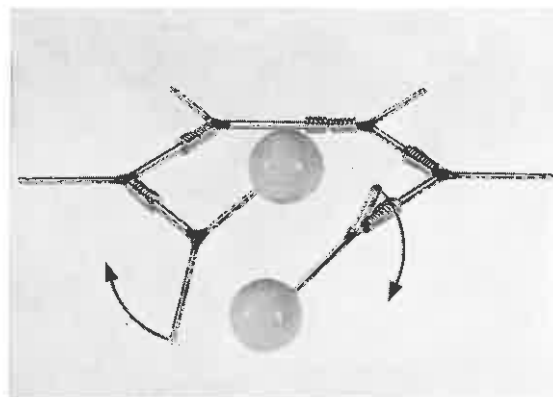


fig. 11 Sphères colorées (Colormark) et ressorts de friction (Rotoresistor)

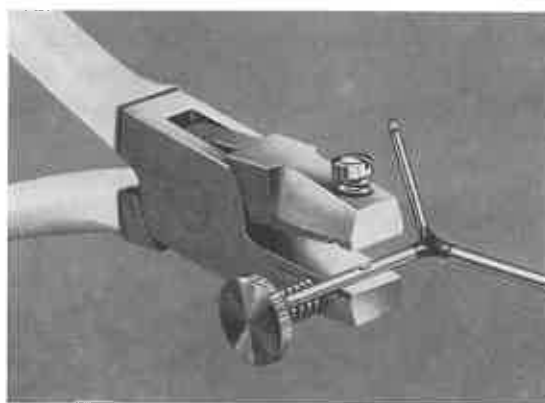


fig. 12 Pince à encastrer (Fixpliers)

8. Constructions spéciales

Nous construisons, sur demande, des unités qui ne sont pas indiquées dans ce catalogue. Joindre à la demande la formule chimique de l'unité, ses dimensions, ses angles et ses possibilités d'emploi. Indiquer éventuellement une référence bibliographique.

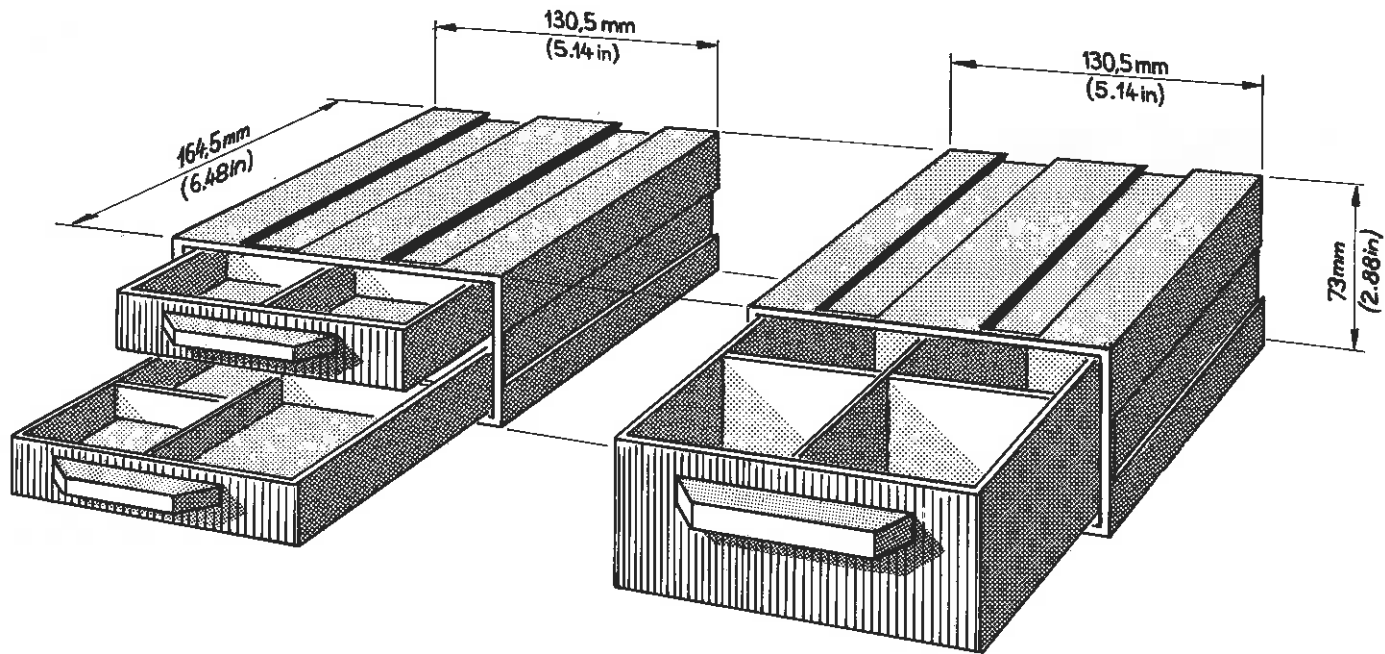
Certains modèles de grandes dimensions, tels que polypeptides (α -Helix), DNA (hélice double), Vitamine B₁₂ (porphyrine), peuvent être également montés et livrés sur commande.

Nous nous ferons un plaisir d'établir un devis pour tous les modèles spéciaux que vous nous demanderez.

Versand- und Aufbewahrungsboxen aus Kunststoff

Plastic boxes for shipment and storage

Boîtes en matière plastic pour l'expédition et le rangement



Bestell-Code:
Order-Code: **Box - B**
Code de commande:

Bestell-Code:
Order-Code: **Box - C**
Code de commande:

Es handelt sich um Kassetten aus schlagfestem Kunststoff mit Schubladen aus Polystyrol, welche durch Zwischenstege individuell unterteilt werden können. Die Boxen lassen sich aufeinander oder nebeneinander zusammenschieben und können zu stabilen Blöcken zusammengebaut werden.

Die Boxen (Kassette mit Schublade und Zwischenstegen) sind in zwei verschiedenen Typen lieferbar und können einzeln bezogen werden.

It refers to boxes of impact-strengthened plastic with drawers of Polystyrene. The subdivisions can be adjusted as one likes. A solid block can be constructed by fitting the boxes on top of each other or one against the other.

Boxes (box with drawers and subdivisions) are available in two different types and can be supplied individually.

Il s'agit de boîtes en matière plastic, résistantes au choc, comprenant des tiroirs en Polystyrène, qui sont subdivisées au moyen de pièces intermédiaires. Les boîtes peuvent être empilées l'une sur l'autre ou l'une à côté de l'autre pour former des blocs compacts.

Ces boîtes (boîte avec tiroirs et pièces intermédiaires) sont livrables en deux types, qui peuvent être achetés séparément.

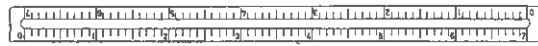
- Die Bausätze werden in folgenden Boxen geliefert:
- The compositions are delivered in the following boxes:
- Les compositions sont livrées dans les boîtes suivantes:

Bausatz Composition	Anzahl Boxen number of boxes nombre de boîtes	
	Typ B	Typ C
Dreiding-Simple	—	1
Dreiding-Normal	2	2
Dreiding-Normal, 5-Ring-Supplement	1	1
3-Ring-Supplement	—	1
4-Ring-Supplement	—	1
7-Ring-Supplement	—	1
Dreiding-Peptide-A	1	3
Dreiding-Porphyrin	1	1
Dreiding-Nucleic-Acid	2	2

DREIDING STEREOMODELS

EDITION 5

1



7 Å=17.50 cm



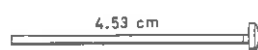
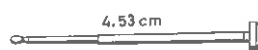
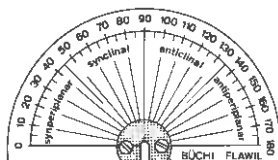
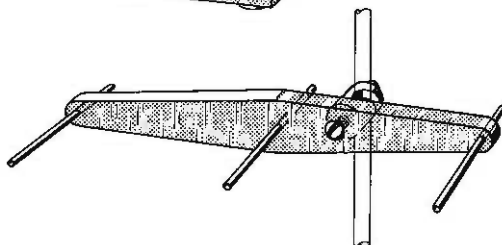
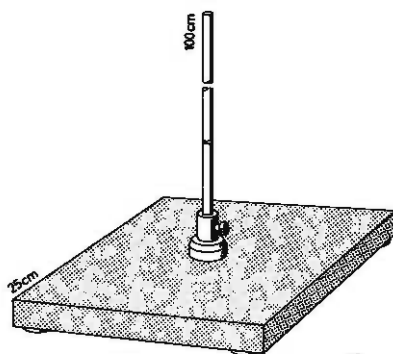
Ø=1.60 cm

blau
blue
bleu

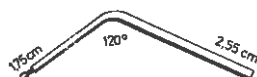
rot
red
rouge

weiss
white
blanc

gelb
yellow
jaune



1.40 cm



ANGSTROEMSCALA

B-COLOMARK

R-COLOMARK

W-COLOMARK

Y-COLOMARK

DNA-BASE WITH ROD

DNA-BASE-PAIR SUPPORT

TORSIOMETER

FIXPLIERS

C-EXTENSION

H-EXTENSION

(nach E. R. H. Jones)

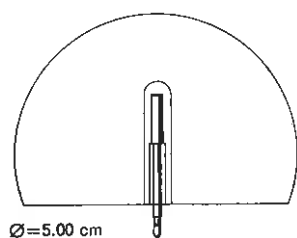
* H-EXTENSION

(nach E. R. H. Jones)

ROTORESISTOR

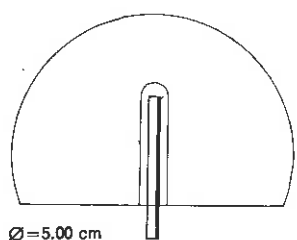
DNA-H-BOND

1



VAN DER WAALS H-RADIUS

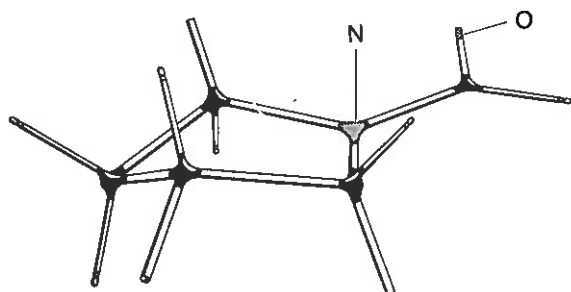
nach E. C. Kooyman
J. Chem. Ed. 40, 204 (1963)



*VAN DER WAALS H-RADIUS

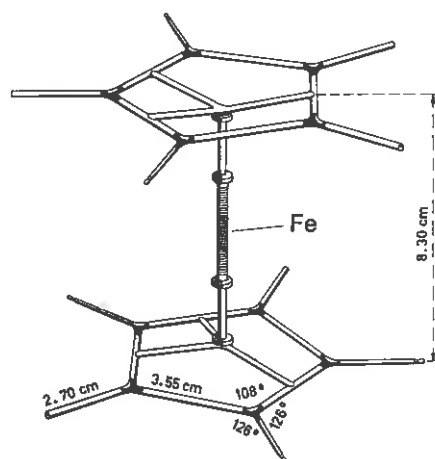
nach E. C. Kooyman
J. Chem. Ed. 40, 204 (1963)

2 b



PROLIN (TRANS)

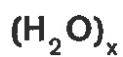
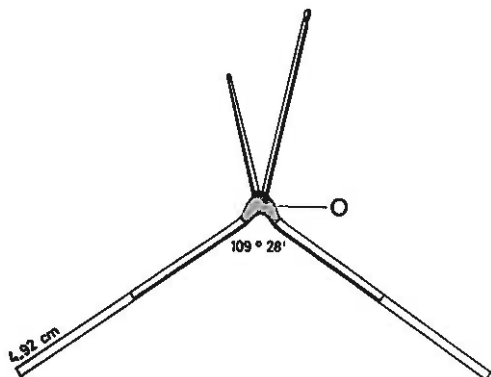
nach R. Weber
Helv. Chim. Acta 6, 2046 (1963)



FERROCEN

nach S. I. Goldberg
J. Am. Chem. Soc 43, 554 (1966)

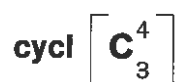
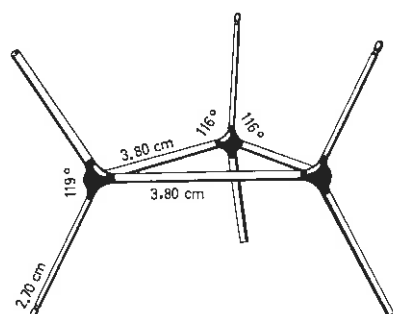
2c



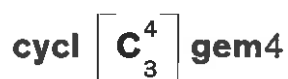
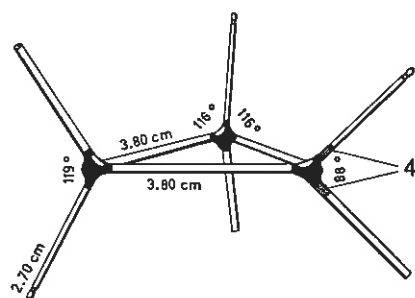
AQUACRIST

10

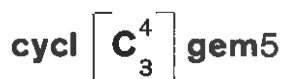
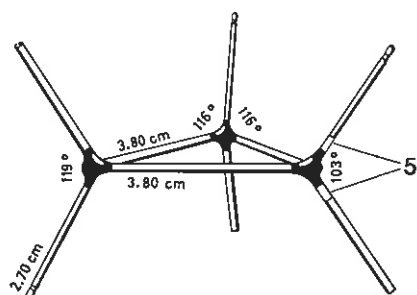
3a



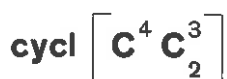
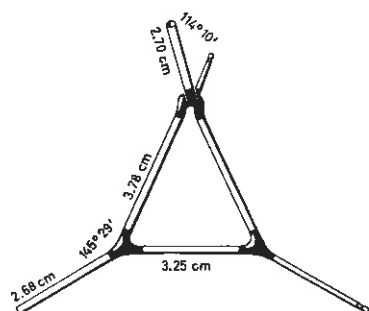
CYCLOPROPAN



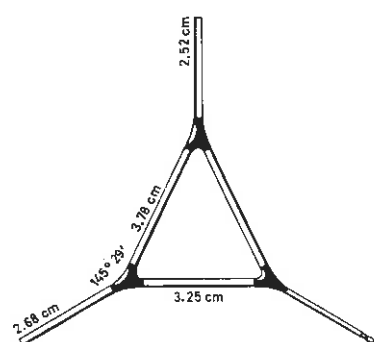
CYCLOPROPANGEM4



CYCLOPROPANGEM5

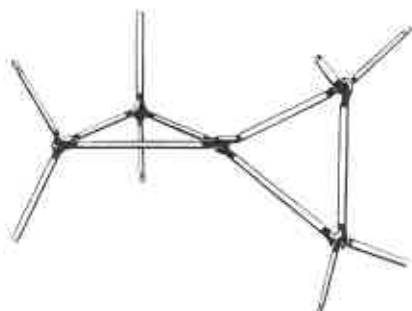
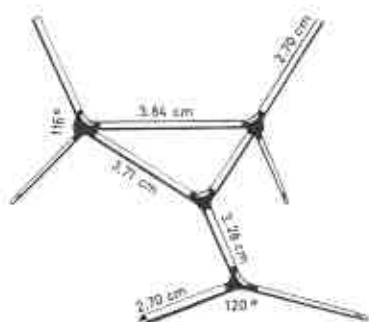


CYCLOPROPEN

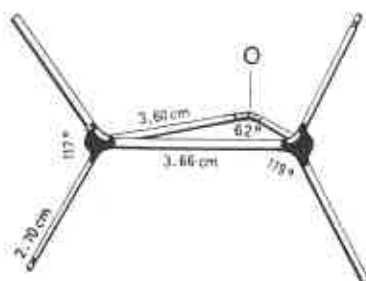
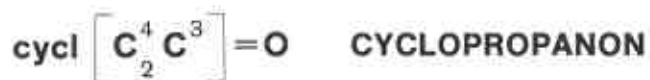
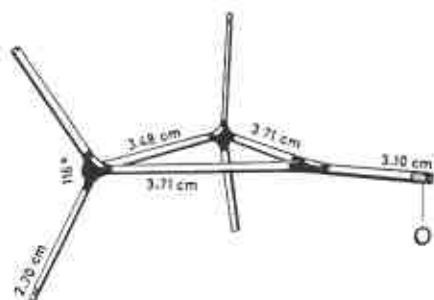
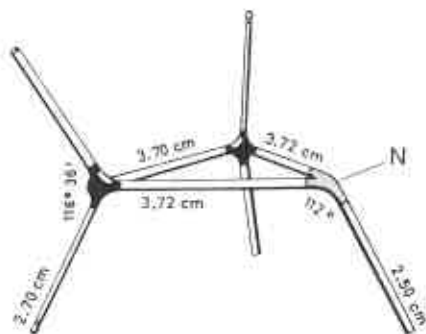


CYCLOPROPYLIUM

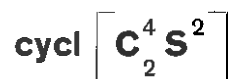
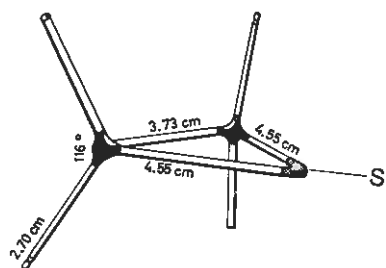
3 a



3b

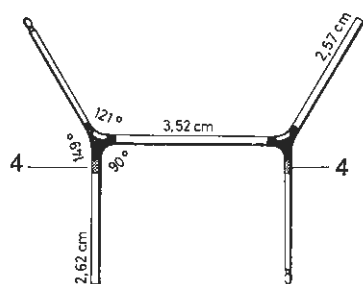


3 b



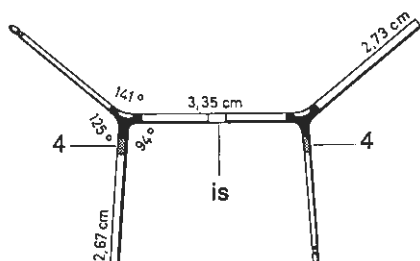
THIIRAN

4a



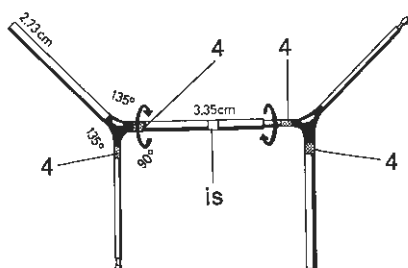
C = Car4en

DOBAROM4ENDO



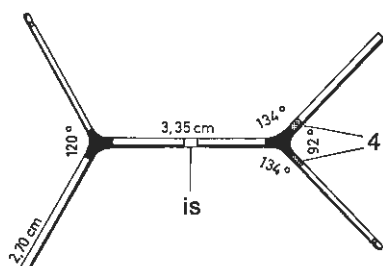
C = C4en

DOB4ENDO



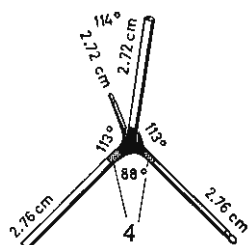
C = C4enfrot

DOB4ENFROT



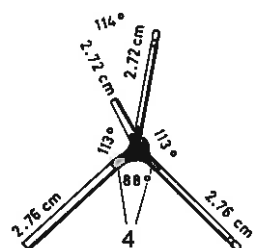
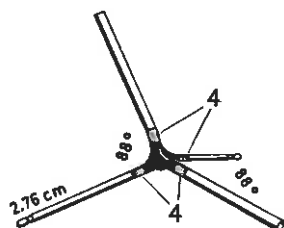
C = C4ex

DOB4EXO

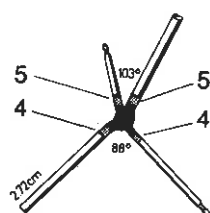
C⁴4

TETRACARBON4

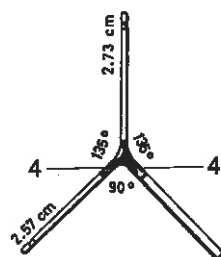
4 a

 $\ast C^4$ $\ast$ TETRACARBON4 $C^4_{4,4}$

TETRACARBON4,4

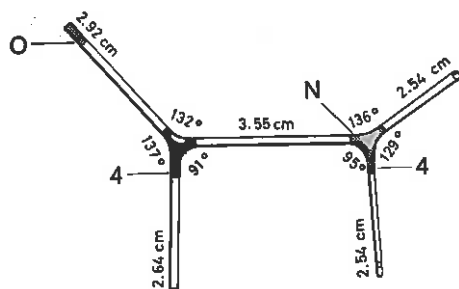
 $C^4_{4,5}$

TETRACARBON4,5

 C^3_4

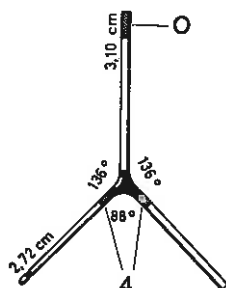
TRICARBON4

4 b



CON=4en

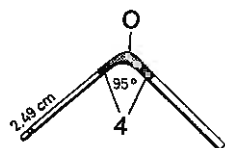
AMID4ENDO



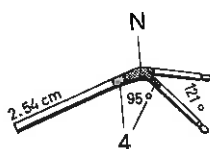
C=O4

CARBONYL4

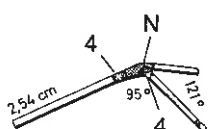
4 c



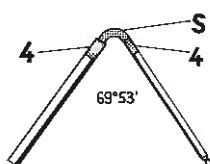
BIOXYGEN4



TRINITROGEN4

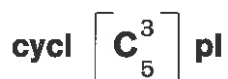
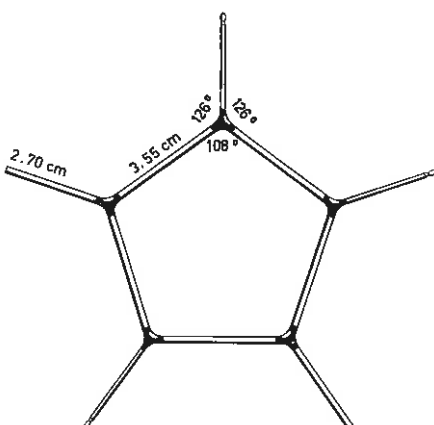


* TRINITROGEN4

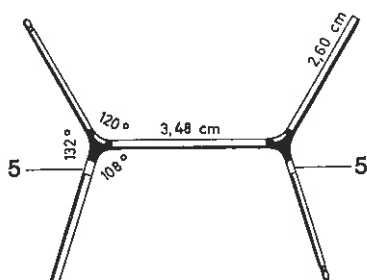


BISULFUR4

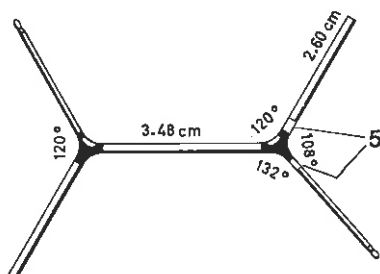
5a



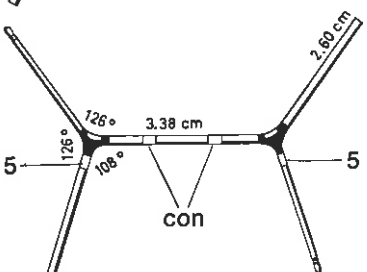
CYCLOPENTADIENYL



DOBAROM5ENDO

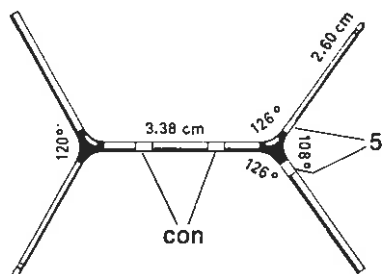


DOBAROM5EXO

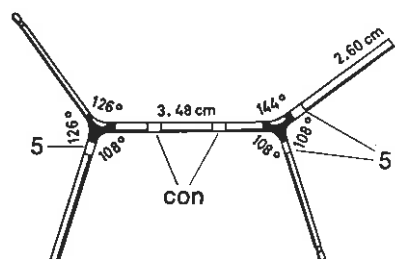


DOBCON5ENDO

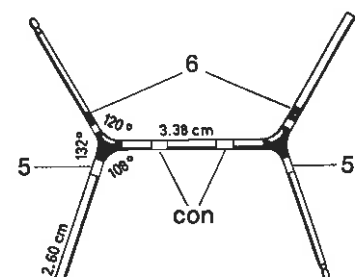
5 a

 $C = C_{con5ex}$

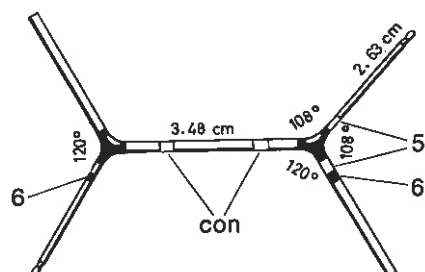
DOBCON5EXO

 $C = C_{con5en5ex}$

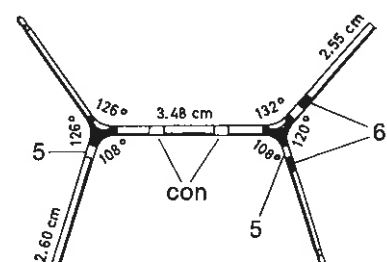
DOBCON5ENDO5EXO

 $C = C_{con5en6en}$

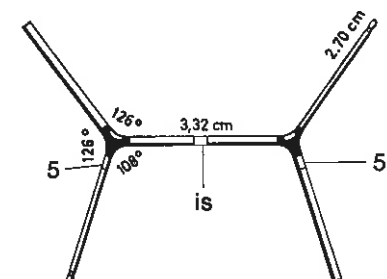
DOBCON5ENDO6ENDO

 $C = C_{con5ex6en}$

DOBCON5EXO6ENDO

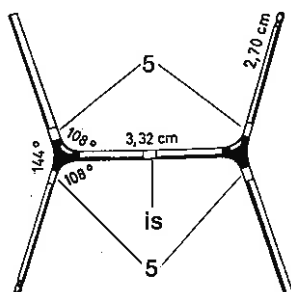
 $C = C_{con5en6ex}$

DOBCON5ENDO6EXO

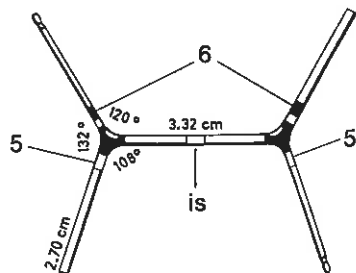
 $C = C_{5en}$

DOB5ENDO

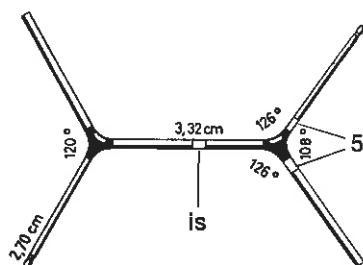
5 a

 $C = C5en5en$

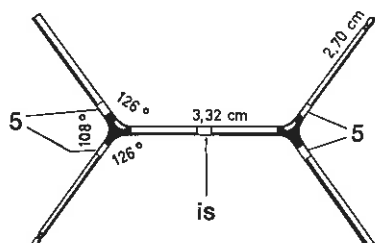
DOB5ENDO5ENDO

 $C = C5en6en$

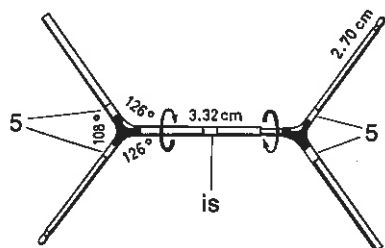
DOB5ENDO6ENDO

 $C = C5ex$

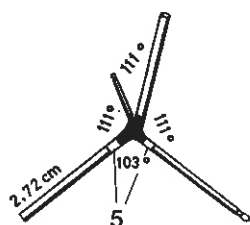
DOB5EXO

 $C = C5ex5ex$

DOB5EXO5EXO

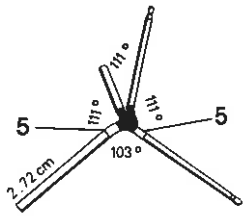
 $C = C5ex5exfrot$

DOB5EXO5EXOFROT

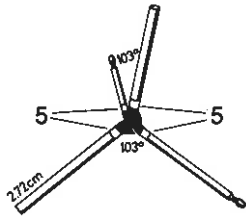
 C^4_5

TETRACARBON5

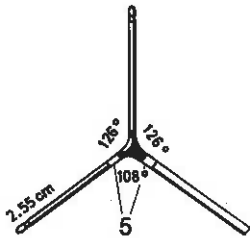
5 a

* C⁴5

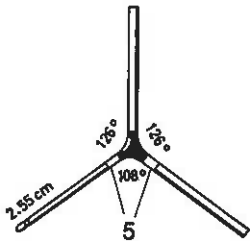
* TETRACARBON5

C⁴5,5

TETRACARBON5,5

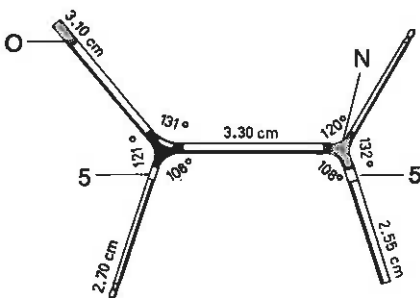
C³ con5pl

TRICARBONCON5PLAN

* C³ con5pl

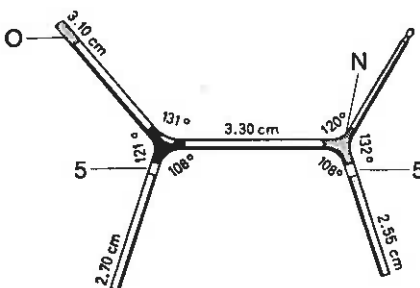
* TRICARBONCON5PLAN

5 b



CON=5en

AMID5ENDO



* CON=5en

* AMID5ENDO