

高等学校教学参考书

有机化合物的异构现象

陆乾生 宋永安 编



人民教育出版社

有机化合物的异构现象，存在十分普遍，异构体的种类和数目十分繁多。它又是有机结构理论的重要组成部分，属于有机化学基础理论之一。

本书特点是系统地把各种异构现象汇总编成一书，按照类别分章阐述，由浅入深，照顾自学。并在适当地方结合应用实例，说明理论对实践的指导作用。

全书共分十章：（一）同分异构现象的发现和分类。（二）烷烃的碳链异构。（三）官能团异构和位置异构。（四）互变异构。（五）价键异构。（六）顺反异构（几何异构）。（七）旋光异构。（八）单糖的异构现象。（九）构象异构（旋转异构）。（十）有关构型的新型表示法。并附录：（1）甲醇系列异构体数目的计算法。（2）甲烷系列异构体数目的计算法。其中以（五）和（十）两章取材较新，附录（1）和（2）较饶兴趣。

本书可作为学习有机化学基础课的辅助读物。在深度和广度上比有机化学基础课的有关内容略有增加，以期收到巩固和提高效果。适合于高等院校的化学和化工类及设置有机化学课程的专业学生阅读和参考；亦可供中学的化学教师和中专毕业水平而从事有机化学有关工作的科技人员参考。

本书由北京大学邢其毅教授审阅。

高等学校教学参考书
有机化合物的异构现象

陆乾生 宋永安 编

*

人民教育出版社出版
新华书店北京发行所发行
北京印刷二厂印装

*

开本 850×1168 1/32 印张 6.25 字数 151,000

1980年3月第1版 1980年12月第1次印刷

印数 00,001—10,800

书号 13012·0447 定 价 0.56 元

目 录

| | |
|-------------------------------------|----|
| 第一章 同分异构现象的发现和分类 | 1 |
| § 1 同分异构现象的发现和有机结构理论的确立 | 1 |
| § 2 同分异构现象的分类 | 8 |
| 第二章 烷烃的碳链异构 | 14 |
| § 1 丁烷、戊烷的同分异构体 | 14 |
| § 2 己烷、庚烷的同分异构体 | 16 |
| § 3 庚烷以后的烷烃的同分异构体数目 | 19 |
| § 4 烷烃的异构化 | 21 |
| 第三章 官能团异构和位置异构 | 24 |
| § 1 烯烃的同分异构现象 | 24 |
| § 2 二烯烃和炔烃的同分异构现象 | 25 |
| § 3 卤代烷、醇、醚等类的同分异构现象 | 26 |
| § 4 醛和酮的羰基位置异构现象 | 32 |
| § 5 羧酸和酯的同分异构现象 | 34 |
| § 6 多官能团化合物的异构现象问题 | 35 |
| § 7 苯环取代物的位置异构 | 35 |
| 第四章 互变异构 | 44 |
| § 1 酮式-烯醇式互变异构 | 45 |
| § 2 含氯化合物的互变异构 | 47 |
| § 3 环-链互变异构 | 48 |
| 第五章 价键异构 | 51 |
| § 1 价键异构现象概述 | 51 |
| § 2 价键异构的定义和特征 | 52 |
| § 3 $(CH)_6$ 张力环的价键异构体 | 55 |
| (一)杜瓦苯 (二)许克耳苯 (三)拉登堡苯或棱柱烷 (四)二环丙烯基 | |
| § 4 其它类型的价键异构体 | 60 |
| 第六章 顺反异构(几何异构) | 62 |

• 1 •

| | |
|---|------------|
| § 1 烯类化合物的顺反异构 | 62 |
| § 2 碳-氯双键和氯-氮双键化合物的顺反异构 | 65 |
| § 3 环型化合物的顺反异构 | 67 |
| § 4 高聚物的顺反异构 | 70 |
| § 5 互变异构体中的顺反异构 | 73 |
| 第七章 旋光异构(光活性异构) | 75 |
| § 1 自然光与偏振光, 旋光仪与比旋光度 | 75 |
| § 2 碳化合物的正四面体的构型和不对称碳原子 | 79 |
| § 3 具有两个不对称碳原子的脂肪族化合物的旋光异构体 | 89 |
| § 4 非碳原子的立体异构体 | 91 |
| § 5 环型化合物的旋光异构 | 94 |
| § 6 组成蛋白质的氨基酸的构型 | 98 |
| § 7 旋光异构现象有关的术语问题 | 100 |
| 第八章 单糖的异构现象 | 102 |
| § 1 糖类——碳水化合物 | 102 |
| § 2 单糖的立体异构现象 | 103 |
| § 3 单糖的旋光异构体的构型 | 109 |
| § 4 单糖的差向异构 | 110 |
| § 5 单糖的环状结构 | 113 |
| § 6 糖的哈武斯结构式 | 118 |
| 第九章 构象异构(旋转异构) | 122 |
| § 1 直链烃及其衍生物的构象 | 122 |
| (一)乙烷 (二)乙烷衍生物 | |
| § 2 环状烃的构象 | 125 |
| (一)环己烷 (二)一元取代环己烷 (三)二元取代环己烷 (四)六元 取代环己烷 | |
| § 3 糖的构象 | 134 |
| (一)吡喃型单糖的构象 (二)吡喃糖、呋喃糖与醛糖的异构化 (三)多 糖的构象式 | |
| § 4 多环烃的构象 | 140 |
| (一)十氢化萘 (二)甾族化合物 | |

| | |
|----------------------------|-----|
| 第十章 有关构型的新型表示法 | 142 |
| § 1 表示光活性异构体构型的 R, S 系统 | 142 |
| § 2 “基团顺序原则” | 144 |
| § 3 表示顺反异构体双键原子构型的 Z, E 系统 | 150 |
| § 4 双键上带氢的顺反异构体的核磁共振谱 | 156 |
| 附录 | 160 |
| § 1 甲醇系列异构体数目的计算法 | 160 |
| § 2 甲烷系列异构体数目的计算法 | 174 |

第一章 同分异构现象的发现和分类

§ 1 同分异构现象的发现和 有机结构理论的确立

在我们初学化学时，学习过定组成定律以后，就了解到化合物都有一定的组成，并且每一种化合物都可以用一个分子式来表明它的成分。例如，二氧化碳可以用 CO_2 表示，水用 H_2O 表示。这是我们所熟悉的。但是，反过来说，凡能用一个分子式来表明的某一种确定成分，是否只有一种化合物呢？

在化学的发展史上曾经有过一种误解，即认为一个分子式所表示的成分就只有一种化合物。因为基于当时的认识水平，认为化合物之不同，化合物之间的性质不同，仅仅决定于分子中成分的不同。这种见解到了 1822~1823 年之间，就被新发现的事实所否定。

1822 年孚勒 (Wöhler) 发现一种化合物叫做异氰酸银，分子式是 AgNCO ，其化学性质比较稳定。1823 年利比希 (Liebig) 又发现一种化合物，组成和异氰酸银相同，亦即这两种化合物都是由一个银原子、一个氮原子、一个碳原子和一个氧原子所组成的一个分子。但其化学性质与异氰酸银不同，它非常不稳定，遇热或受撞击就会立即发生爆炸。当时化学界发生了剧烈争论，是否分析结果有差错呢？或是定组成定律有问题呢？后来证实了分析结果没有差错，定组成定律也没有问题，而是同分异构现象的出现。原来在 1823 年利比希所发现的那个容易爆炸的化合物，是和孚勒先前发现的异氰酸银是不相同的另一种化合物，命名为雷酸银 AgONC ，

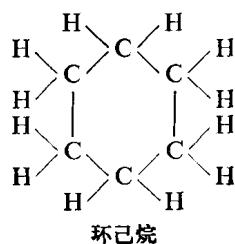
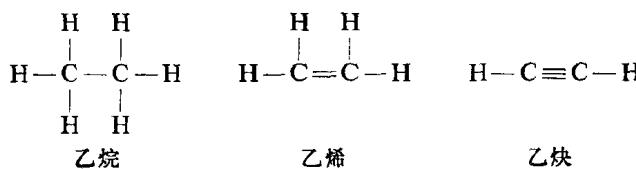
虽然这两种化合物有相同的组成，但是它们的分子中各原子排列的次序有差别，就是说两者之间的分子结构有不同。这些具有相同分子式而有不同结构式的化合物，互称为同分异构体。

同分异构现象发现以后，不仅纠正了过去认为一个分子式仅能表示一种化合物的错误见解，同时，又推动了有机化学的向前发展。在有机化学中，同分异构现象极为普遍，是有机化合物数目繁多的主要原因之一；同分异构现象的发现，也推动了有机化学结构理论的确立。

在 1859~1861 年，有机结构学说已成为比较完整的理论，它的基本要点如下：

(1) 碳原子是四价的 还注意到碳原子的四个价键是相等的。碳原子这种恒定的化合能力说明当它形成化合物时要求达到它的饱和度，即把四个价键都用来和其它的原子结合。

(2) 碳原子的成链性 碳原子不但可以和其它元素结合，而且特别在碳原子和碳原子之间很容易地互相结合成为或长或短的碳链。碳原子与碳原子的结合，不单只可以用单键相连接，而且还可以用双键或叁键相连接。既可以连接成直链，也可以连接成环链。例如：



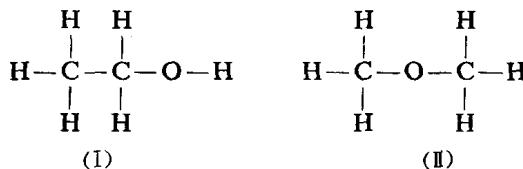
(3) 化学结构的概念 物质中各种原子以一定的数目和一定的次序互相结合,这种结合的关系叫做化学结构。

(4) 化学结构与性质的依赖关系 分子的化学结构不同，便引起了性质上的差异。因此，我们可以从分子的化学结构去了解或预测它的许多化学性质；反之，也可以通过对其化学性质的研究来确定它的化学结构。

(5) 分子中原子间的相互影响 分子中各原子并不是孤立存在的，而是在一定的化学结构中相互联系相互影响的。它们往往由于受着其它原子的影响，而改变了自己的性质。分子中各原子间的相互影响，不但存在于直接相连结的原子之间，而且也存在于不直接相连结的原子之间。前者是首要的，后者是次要的。

根据上述化学结构的理论，就可以说明同分异构现象发生的原因。假如有两个化合物的分子中，所含原子的种类和数目相同，亦即它们的分子组成是相同的，但是彼此在原子之间相互连接的次序不同，亦即彼此的化学结构不同，则这两个化合物的性质应当是不同的。它们虽有相同的分子式，但具有不同的结构式。也就是说，它们是同分异构体。

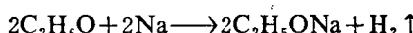
例如，同一个分子式 C_2H_6O ，可以有如下两种不同的结构式：



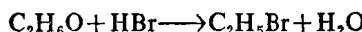
(I)和(II)式代表两个同分异构体。(I)式中两个碳原子连成一条碳链,六个氢原子中有五个是和碳原子相连的,其余一个氢原子和氧原子相连,而氧原子又连到其中一个碳原子上,使氢和氧形成一个叫做“羟基”的原子团。(II)式的排列方式却不同,两个碳原子各在一边和氧原子相连成链,而六个氢原子都和碳原子连接,处于

等同地位。上面两个结构式是根据化学结构理论推导写出来的，是否符合客观实际呢？还必须作一系列的实验鉴定这两个化合物的化学性质来加以判断。

(I) 式化合物是个液体，它能和金属钠发生反应而放出氢气，生成物的分子式为 C_2H_5ONa ，其反应式应为：



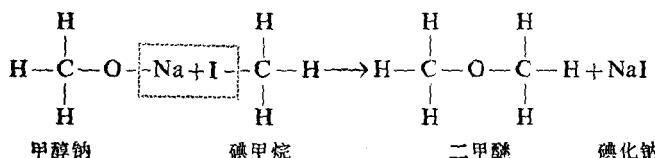
这个反应说明在 C_2H_6O 中有一个氢原子是和其它五个氢原子的性质不同，金属钠原子只能取代其中的一个氢原子而不能取代其余的五个氢原子，因此，可把分子式进一步写成 $C_2H_5O(H)$ ，这叫做示性式。然后再证明这个能被钠原子取代的氢原子，是否和氧原子连接在一起形成羟基($-OH$)？我们可以利用氢溴酸 HBr 和这个液体化合物作用，结果生成分子式为 C_2H_5Br 的溴乙烷和水。其反应式应为：



反应结果表明溴乙烷 C_2H_5Br 的生成，是由于 HBr 中的 Br 原子取代了 C_2H_6O 中的一个氢原子和一个氧原子所组成的羟基($-OH$)而获得的。这样， C_2H_6O 的那个液体化合物就应该写成 $C_2H_5(OH)$ 的示性式。如用共价键把各个原子连接起来就成上述(I)式所表示的结构式，就是由乙基和羟基所组成的醇类，它是分子中含有两个碳原子的醇类，叫做乙醇。

(II) 式所表示的化合物是个气体。其性质和乙醇不同，它不和金属钠作用，也不和氢溴酸作用，证明其分子中不含有羟基($-OH$)，既然没有氢原子和氧原子连接，那么，分子中的六个氢原子只可能象(II)式所写出的样子都和碳原子连接，成为两个甲基(CH_3-)通过一个氧原子作桥梁而联接起来。又根据烃类化学性质推想，与碳原子连接的氢原子是不受金属钠所取代的，为了确定它的结构式是否符合推想的(II)式，可以通过实验合成(II)式所表示

的化合物来证明。我们用甲醇钠和碘甲烷作用，就发生下列反应：

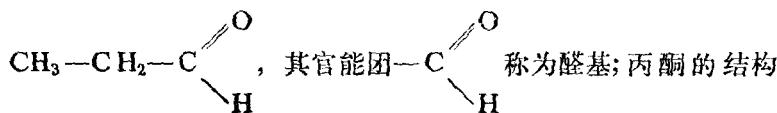


生成的二甲醚是具有分子式 $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ 的气体化合物。上述反应式可以看出二甲醚分子的两个甲基，一个从甲醇钠得来，另一个从碘甲烷得来，二者之间靠“氧桥”($-\text{O}-$)连接，其结构式是和(I)式吻合的。凡是由两个烃基靠氧桥连起来的一类化合物，命名为醚类。氧桥(夹在两个烃基之间的)就是醚类的官能团，也称为醚键。由二个甲基靠氧桥连接而成的醚，就叫二甲(基)醚。

乙醇和二甲醚属于同分异构体，这种异构体的区分特点在于两者所含的官能团不同：乙醇含有羟基($-\text{OH}$)，它在醇类中特称为醇基，二甲醚则含有醚基($\text{C}-\text{O}-\text{C}$)。这类的同分异构体属于官能团同分异构体，这种同分异构现象，称为官能团结构异构现象。

由于官能团是有机化合物分类的基础，把官能团相同的化合物归为一类，把不同官能团的化合物归属于不同类别。因此，官能团结构异构体就区别在含有不同的官能团，那么官能团结构异构体也必然分属于不同类的化合物（这个结论只适用于单纯一种官能团的结构异构体）。

不仅醇类和醚类存在有官能团结构异构现象，在醛和酮，羧酸和酯等都存在有官能团结构异构现象。例如，丙醛和丙酮，共同具有分子式 $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ ，但分子结构不同，前者的“羰基”在碳链之首，而后的羰基却与两个烷基相连。丙醛的结构式是



式是 $\text{CH}_3-\overset{\text{O}}{\underset{\parallel}{\text{C}}}-\text{CH}_3$, 其官能团 $-\overset{\text{O}}{\underset{\parallel}{\text{C}}}-$ 则称为酮基。又如, 丙酸

$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\underset{\parallel}{\text{C}}}-\text{OH}$ 和乙酸甲酯 $\text{CH}_3-\overset{\text{O}}{\underset{\parallel}{\text{C}}}-\text{O}-\text{CH}_3$ 及甲酸乙

酯 $\text{H}-\overset{\text{O}}{\underset{\parallel}{\text{C}}}-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$, 它们都具有相同分子式为 $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$, 属于同分异构体。其中丙酸和两个酯是属于官能团结构异构体; 而乙酸甲酯和甲酸乙酯, 同是酯类化合物, 因具有相同的官能团——

酯基 ($-\overset{\text{O}}{\underset{\parallel}{\text{C}}}-\text{O}-\text{C}-$), 只不过是酯基所在分子链上的位置不同而引起的异构现象, 所以上述这两个酯是属于官能团位变异构体。

在烃类中, 广泛存在着异构现象。例如, 具有分子式为 C_4H_{10} 的丁烷, 就有正丁烷 $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ 和异丁烷 $\text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_3$ 是属于碳链异构现象, 起因于碳链的分支。也有



官能团异构现象, 例如, 丙烯 $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}_2$ 与 环丙烷

$\begin{array}{c} \text{CH}_2 \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{CH}_2-\text{CH}_2 \end{array}$ 分子式同为 C_3H_6 ; 又如, 丁炔-1 $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$ 和 丁炔-2 $\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_3$, 以及丁二烯-1, 3 $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$ 和 丁二烯-1, 2 $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{C}=\text{CH}_2$ 分子式同为 C_4H_6 , 在后面四个例子中, 炔类和二烯类的异构是属于官能团结构异构体, 而两个炔之间的异构, 和两个二烯之间的异构, 则属于官能团位变异构体。

由此可见, 在有机化合物中, 官能团结构异构现象十分普遍, 因此, 如果采用分子式来表示有机化合物的话, 除了结构十分简单者如甲烷 CH_4 , 氯甲烷 CH_3Cl , 二氯甲烷 CH_2Cl_2 , 氯仿 CHCl_3 , 四

氯化碳 CCl_4 等之外，其余简单到如用 C_2H_4 来表示乙烯，用 C_2H_2 来表示乙炔都会感到不够明确，各元素的化合价看不清楚，结构的特点也表示不出来，遇到同分异构体则更无从区别，这是分子式表示法的局限性带来的缺点。如果采用结构式表示法，乙烯写成

$$\begin{array}{c} \text{H} & \text{H} \\ | & | \\ \text{H}-\text{C}=\text{C}-\text{H} \end{array}$$

乙炔写成 $\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$ ，则原子的化合价和分子的结构特点就一望而知，遇到同分异构体时更非用结构式来表示不可。

也许会有这样的疑问：为什么无机化合物就可以用分子式表示呢？原因是无机物的分子结构比较简单，常以离子键形式结合起来，因而无机物的同分异构现象很少。通常遇到的无机化合物采用分子式表示不至于引起混乱，情况和有机物并不一样。无机物也有同分异构现象，多出现在一些比较复杂的络合物之间。兹举一个例子说明：溴化一硫酸根五氨钴 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{SO}_4]\text{Br}$ 和硫酸一溴五氨钴 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Br}]\text{SO}_4$ 这两种无机物的化学性质是不同的，第一种化合物与硝酸银溶液作用，生成溴化银沉淀，但不与氯化钡溶液反应。第二种化合物则恰巧相反，能与氯化钡溶液作用生成硫酸钡沉淀，却不与硝酸银溶液反应。说明这两种无机物在水中电离生成不同的离子，第一种生成 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{SO}_4]^+$ 阳离子和 Br^- 阴离子，第二种生成 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Br}]^{2+}$ 阳离子和 SO_4^{2-} 阴离子。这种同分异构体在无机化学中叫做电离同分异构体。

在化学发展史上，最初认识到分子由原子组成，后来又发现了分子中各种原子有一定比数及有一定的分子量，从而确立用分子式来表示一个化合物，这是人们认识上的一个飞跃，但在那时对于分子内各原子的排列状况还不清楚，甚至认为各原子组成分子的状况就好象砖块堆砌成一个建筑物一样，化学变化表明分子的组合发生改变，就象把一座亭子的砖块拆卸另外砌成一所房子。那时

还未明白原子之间结合成分子时是具有结合力的性质，即不懂化学键的存在，而笼统地叫做亲和力。从分子中各原子的机械地堆砌的观念发展到分子中各原予以化学键连结成一定次序的观念，又是人们认识上进一步的飞跃。就是说化学结构理论的确立，人们对分子内部结构状况的认识是比以前跨进一大步了。其后随着量子力学和现代化学结构理论的发展，人们更为深入地更为完善地了解到有机化合物内部结构的本质。

“人们对于在各个一定发展阶段上的具体过程 的认识只具有相对的真理性。无数相对的真理之总和，就是绝对的真理。客观过程的发展是充满着矛盾和斗争的发展，人的认识运动的发展也是充满着矛盾和斗争的发展。一切客观世界的辩证法的运动，都或先或后地能够反映到人的认识中来。”这对于我们认识分子结构问题，对于认识同分异构现象问题，都有极大的指导意义。

§2 同分异构现象的分类

前面已经提到，具有相同分子式而性质和结构不相同的化合物叫做异构体，这种现象叫做异构现象。

异构现象首先划分为结构异构(或称构造异构)和立体异构两大类。每大类又可再分为几个小类，不过在文献中不尽相同，目前还未有统一规定。

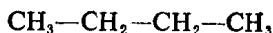
(一) 结构异构(或构造异构)

由于分子中原子互相连接的次序不同(亦即分子式相同而结构式不同)所产生的异构现象，叫做结构异构。

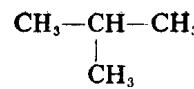
结构异构又再细分为下列五类：

(1) 碳链异构 又称碳架异构或碳架异构。是由于碳链(碳的骨架)不同而产生的异构现象。例如，直链烃中的正丁烷和异

丁烷:

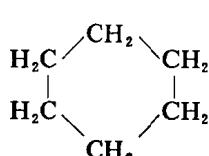


正丁烷

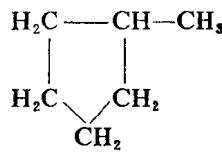


异丁烷

又如, 环链烃中的环己烷和甲基环戊烷:

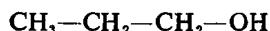


环己烷

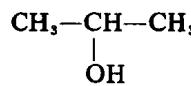


甲基环戊烷

(2) 位置异构 又称位变异构。由于取代基团或官能团在碳链上或碳环上的位置不同而产生的异构现象。例如, 正丙醇和异丙醇:

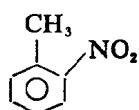


正丙醇

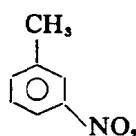


异丙醇

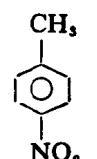
又如, 硝基甲苯的邻、间、对三种异构体:



邻硝基甲苯

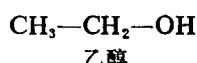


间硝基甲苯

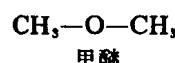


对硝基甲苯

(3) 官能团异构 由于分子中官能团不同而产生的异构现象。例如, 乙醇和甲醚:

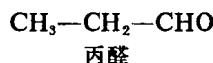


乙醇

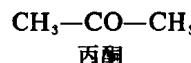


甲醚

又如, 丙醛和丙酮:



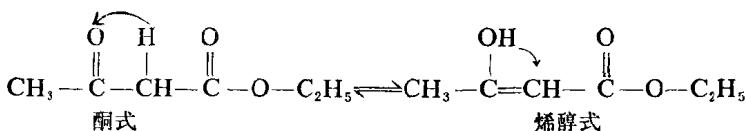
丙醛



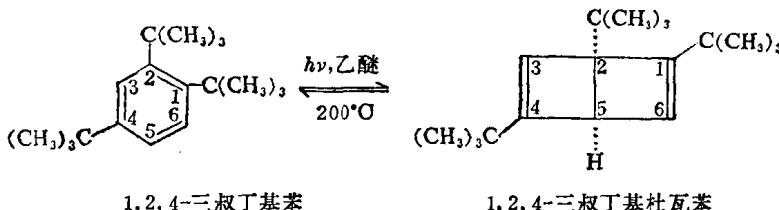
丙酮

(4) 互变异构 是官能团异构的一种特殊表现形式。在分类

上也有划归官能团异构一类的。它的特点是异构体可以迅速地直接互相变换。亦即由一个异构体的某原子转移位置与其它原子连接而成另一个异构体，而后者又可将移位的某原子回复其原来连接的次序，又成为原初的异构体。这种互变可以同时发生达到平衡。例如，乙酰乙酸乙酯有酮式和烯醇式的两种异构体，它们可迅速直接互变：



(5) 价键异构 价键异构现象是由于分子中某些价键的分布发生了改变而与此同时改变了分子的几何形状。例如, 1,2,4-三叔丁基苯在光照下, 乙醚作溶剂, 价键发生改变, 生成分子的几何形状不同的 1,2,4-三叔丁基杜瓦苯。如下式所示:



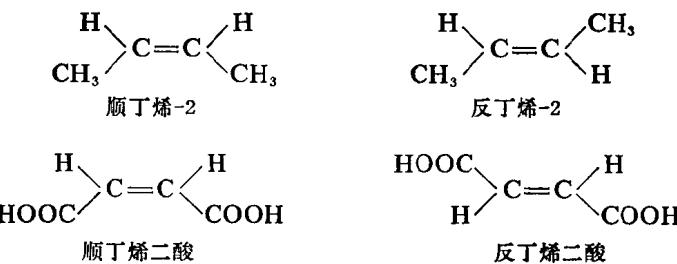
(二) 立体异构

分子中原子或原子团互相连接的次序相同(即结构相同),但在空间的排列方式却不相同,这样产生的异构现象叫做立体异构。通常把原子或原子团在空间的排列方式叫做构型。因此,立体异构体的分子式和结构式都相同,只是构型式不同。

立体异构现象又可分为三类：

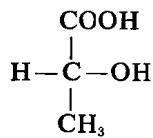
(1) 几何异构 又称顺反异构或反顺异构。在此类异构现象中最典型的是由于双键不能自由旋转的特性，组成双键的这两个碳原子的另外两个价键，如果结合着不同的原子或原子团，这时便

出现顺反异构体。例如，丁烯-2有顺式和反式，丁烯二酸也有顺式和反式：

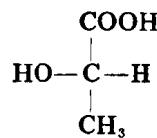


(2) 旋光异构 具有不同旋光性的立体异构体叫做旋光异构体。一个有机化合物，如果分子中含有不对称的碳原子或没有对

称因素时就出现旋光异构现象。例如，乳酸 $\text{CH}_3-\overset{\text{H}}{\underset{\text{OH}}{\underset{|}{\underset{*}{\text{C}}}}-\text{COOH}$ 分子中带星号*的碳原子所连接的四个原子或原子团是不相同的，这个碳原子叫做不对称碳原子。所连接的四个原子或原子团在空间的排列可有两种方式，用下列两个式子来表示乳酸具有旋光性不同的异构体：



(-) - 乳酸(左旋乳酸)

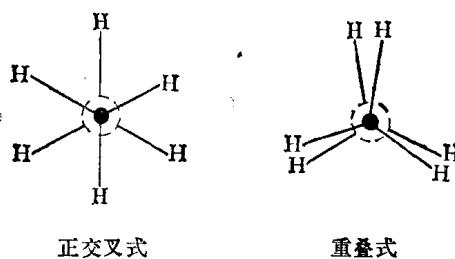


(+) - 乳酸(右旋乳酸)

上列的式子不仅表示分子中原子或原子团的连接次序，而且要表示出空间的排列方式，这叫做构型式。它的写法有一定规则（见后），是应当注意的。

(3) 构象异构 由于围绕单键旋转而产生的分子中原子或原子团的不同排列形式，叫做构象异构，又称旋转异构。构象的名称

使用得更为通常而普遍。例如，构成乙烷 CH_3-CH_3 分子的两个甲基— CH_3 ，当围绕着 C—C 单键旋转时，当旋转的角度不同，则一个甲基上面的氢原子与另一个甲基上的氢原子在空间的相对位置会随着变化，如转到下图所示的两个位置时：



左边的图象叫正交叉式，右边的图象叫重叠式。上述图象的看法，是把乙烷分子沿着碳-碳单键的键轴去看的，因此图上看不出 C—C 单键。虚线圆圈○表示后面甲基的碳原子，绘得稍大些；黑圆●表示前面甲基的碳原子，绘得小些，使前后两个甲基分别连接的 H 原子可以看得较清楚（上图重叠式所绘的 H 原子有意绘偏一些以免前面的遮掩了后面的）。

由图可以看出，正交叉式两个甲基上的 H 原子空间距离最远，彼此间斥力（范德华力）最小，乙烷分子能量最低因而也最稳定；而重叠式两个甲基上的 H 原子空间距离最近，彼此间斥力最大，乙烷分子能量最高因而最不稳定。因此，要研究分子的稳定性（与分子的存在状态及反应性能有密切关系），就得进行构象分析，才能理解得更为深刻。

构象和构型一样，也是表示分子中原子或原子团在空间的排列的不同形式。所不同者，构象可以通过单键的旋转而互变，故在一般情况下不能分离开来，这一点和一般同分异构体之能分离开来是有不同的，但在互变中的构象也是空间因素引起的异构现象，已证明是客观存在的现象。当在围绕单键旋转受到障碍很大时也