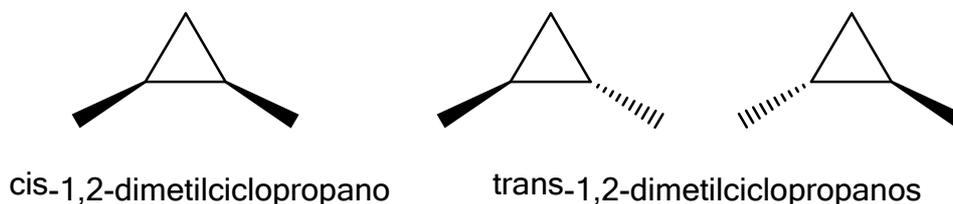


Práctica 12: Equilibrio conformacional en cicloalcanos disustituídos

Los cicloalcanos que poseen dos sustituyentes en átomos distintos presentan estereoisomería. Por ejemplo, el 1,2-dimetilciclopropano presenta dos diastereoisómeros, que se designan como *cis*- y *trans*-1,2-dimetilciclopropano.



1.- Calcular la energía estérica de los siguientes compuestos, asignar la configuración relativa *cis*- o *trans*-, indicar qué tipo de estereoisomería presentan con respecto al primer compuesto de la tabla y justificar las diferencias energéticas obtenidas.

Compuesto	E_{TINKER}	Configuración relativa	Relación de estereoisomería	ΔE
(1 <i>R</i> ,2 <i>R</i>)-1,2-dimetilciclopropano			El mismo compuesto	0
(1 <i>S</i> ,2 <i>S</i>)-1,2-dimetilciclopropano				
(1 <i>R</i> ,2 <i>S</i>)-1,2-dimetilciclopropano				

2.- Calcular la energía estérica de los distintos conformeros de los siguientes compuestos e indicar la energía de la conformación más estable. Evaluar la diferencia energética entre las configuraciones *cis*- y *trans*- y compararla con la diferencia que hay entre los calores de combustión (H_{comb}).

Compuesto	E_{TINKER}	H_{comb}	ΔH_{comb}	ΔE_{TINKER}	Estereoisómero más estable
<i>cis</i> -1,2-dimetilciclohexano		1248.3	---		
<i>trans</i> -1,2-dimetilciclohexano		1246.8	1.5		
<i>cis</i> -1,3-dimetilciclohexano		1245.7	---		
<i>trans</i> -1,3-dimetilciclohexano		1247.4	1.7		
<i>cis</i> -1,4-dimetilciclohexano		1247.4	---		
<i>trans</i> -1,4-dimetilciclohexano		1245.7	1.7		

3.- Dibujar la conformación más estable de cada una de los compuestos anteriores.