

TEMA 6. ANALISIS CONFORMACIONAL

EJERCICIOS

1. Trace la conformación más estable del pentano, con cuñas y líneas punteadas para representar los enlaces que salen del papel hacia delante y hacia atrás, respectivamente.
2. Trace la conformación más estable del 1,4-diclorobutano use cuñas y líneas punteadas para representar los enlaces que salen del papel hacia delante y hacia atrás, respectivamente.
3. Dibuje la conformación más estable del 1,4-dicloroetano en perspectiva y en Newman.
4. Elabore un diagrama cualitativo de energía potencial para la rotación en torno al enlace C–C del 1,2-dibromoetano. ¿Cuál conformación espera que sea más estable? Identifique las conformaciones anti y gauche del 1,2-dibromoetano.
5. Considere el 2-metilbutano y vea de frente el enlace C2–C3
 - a) Trace una proyección de Newman de la conformación más estable y otra de la menos estable.
 - b) Si una conformación eclipsada CH₃–CH₃ representa 2,5 kcal/mol y una gauche 0,9 kcal/mol, trace una gráfica cuantitativa de la energía potencial en función de la rotación alrededor del enlace C2–C3.
6. Dibuje el diagrama de energía potencial esperado para la rotación alrededor del enlace C2–C3 en el 2,3-dimetilbutano.
7. Trace un anillo de ciclohexano en forma de silla e identifique todas las posiciones como axiales o ecuatoriales.
8. Trace dos conformaciones diferentes de silla para el *trans*-1,4-dimetilciclohexano identificando los enlaces axiales y ecuatoriales.
9. Explique las afirmaciones siguientes:
 - a) Un ciclohexano *cis*-1,2-disustituido debe tener un grupo axial y un grupo ecuatorial.
 - b) Los dos grupos de un ciclohexano *trans*-1,2-disustituido tienen que ser axiales o ecuatoriales.

10. a) ¿Por qué el ciclohexano *cis*-1,3-disustituido es más estable que su isómero *trans*?
- b) ¿Por qué el ciclohexano *trans*-1,2-disustituido es más estable que su isómero *cis*?
- c) ¿Qué es más estable, un ciclohexano *trans*-1,4-disustituido o su isómero *cis*?
11. ¿Cómo puede explicar que un sustituyente *terc*-butilo axial tenga mucho mayores interacciones 1,3-diaxiales que el isopropilo y que éste se parezca más al etilo y al metilo? Puede utilizar modelos moleculares para ayudarse en su respuesta.
12. ¿Por qué cree que un sustituyente *ciano* casi no causa tensión estérica 1,3-diaxial (0,4 kJ/mol)? Utilice modelos moleculares.
13. Dibuje la conformación *silla* más estable de las moléculas siguientes:
- trans*-1-Cloro-3-metilciclohexano
 - cis*-1-Etil-2-metilciclohexano
 - cis*-1-Bromo-4-etilciclohexano
 - cis*-1-*terc*-Butil-4-etilciclohexano

<u>Interacción</u>	<u>Kcal/mol</u>
CH ₃ –CH ₃ gauche	0,9
H–H eclipsado	1,0
H–CH ₃ eclipsado	1,4
CH ₃ –CH ₃ eclipsado	2,5