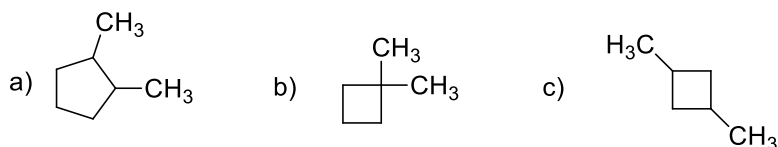


QFL 2340- Estrutura e Propriedade de Compostos Orgânicos – 2014

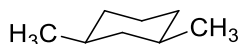
Lista 05: Análise Conformacional

- Desenhe na forma de cavalete as seguintes estruturas.
 - propano, na conformação alternada;
 - propano, na conformação eclipsada.
 - butano, anti;
 - butano, gauche.
- Desenhe o diagrama de energia potencial vs ângulo torsional da rotação da ligação C-C do átomo central do propano. Identifique os máximos e os mínimos de energia, mostrando as formas eclipsadas, alternadas e gauche, utilizando projeções de Newman. Este diagrama parece mais com o do etano ou do butano? Compare a energia de ativação de rotação do propano com a do etano e com a do butano.
- Utilizando projeções de Newman, desenhe cada uma das seguintes moléculas na sua conformação mais estável com relação à ligação indicada.
 - 2-metilbutano, ligação C2-C3;
 - 2,2-dimetilbutano, ligação C2-C3;
 - 2,2-dimetilpentano, ligação C3-C4;
 - 2,2,4-trimetilpentano, ligação C3-C4.

- Indique qual das moléculas abaixo apresenta isomerismo *cis-trans*. Desenhe os isômeros *cis* e *trans*.

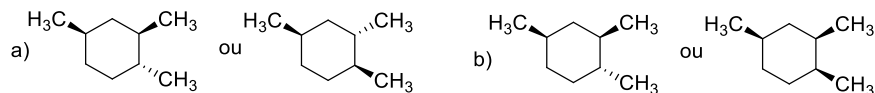


- Para a seguinte conformação cadeira do 1,3-dimetilciclo-hexano diga:



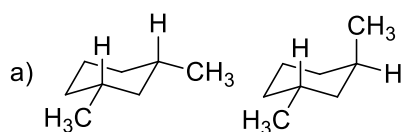
- A conformação cadeira apresentada acima representa o *cis*-1,3-dimetilciclo-hexano ou o *trans*-1,3-dimetilciclo-hexano? b) Desenhe a conformação cadeira alternativa deste isômero. Qual das duas possíveis conformações cadeira é a mais estável? Por quê? c) Desenhe a representação planar hexagonal do isômero acima.

- Identifique o estereoisômero mais estável de cada um dos pares abaixo, explicando o porquê da sua escolha.

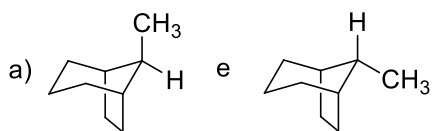


- 1-Metilciclo-hexeno é mais estável do que metilenociclo-hexano, mas metilenociclopropano é mais estável do que 1-metilciclopropeno. Explique.

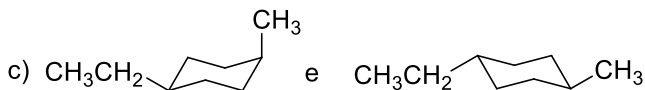
- Qual dos seguintes isômeros tem o menor calor de combustão? Justifique sua resposta.



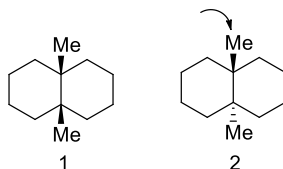
9. Determine se os pares de estruturas abaixo representam isômeros constitucionais, diferentes conformações do mesmo produto, ou estereoisômeros que não podem ser interconvertidos através de rotação ao redor de uma ligação.



b) *cis*-1,2-dimetilciclopentano e *trans*-1,3-dimetilciclopentano



10. a) A *cis*-9,10-dimetildecalina (**1**) deve ter uma energia maior, menor ou similar quando comparada com a da *trans*-9,10-dimetildecalina (**2**)? Justifique. Procure incluir em sua justificativa a conformação mais estável de **1** e de **2**.



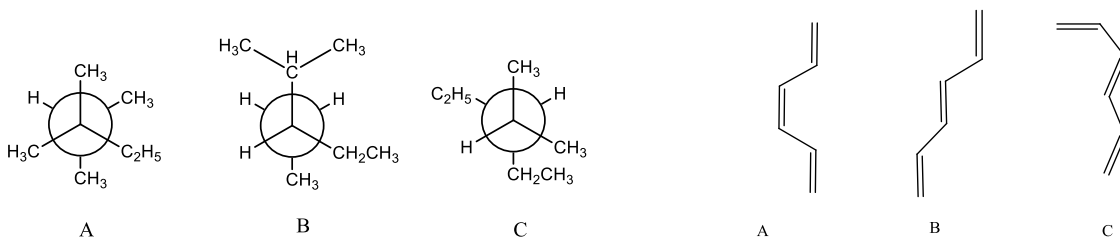
b) Desenhe todos os hidrogênios ligados a anéis na conformação mais estável da estrutura **2**.

c) Classifique cada um dos hidrogênios desenhados em b como equatorial ou como axial.

d) Indique um hidrogênio que esteja em *cis* com a metila indicada com a seta na estrutura 2. Indique também um hidrogênio que esteja em *trans* com relação à mesma metila.

11. Sabendo que dados de infravermelho indicam a presença de ligações de hidrogênio intramoleculares, desenhe a projeção de Newman da conformação mais estável da 1-hidroxiopropanona.

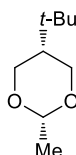
12. Em cada grupo, indique as estruturas que representam o mesmo composto.



13. a) Desenhe uma conformação cadeira para o *cis*-5-*t*-butil-2-metil-1,3-dioxano, cuja estrutura está mostrada abaixo.

b) Faça a inversão da conformação cadeira indicada em a.

c) Qual das duas conformações indicadas acima deve ser a mais estável? Explique.



21. Uma das mais importantes reações em química orgânica é a de Diels-Alder (Figura 1). Nesta reação, o dieno precisa estar na conformação *s-cis*. Desta forma, dienos fixos nesta conformação são bastante reativos, enquanto que os fixos na *s-trans* não reagem (Figura 2). Com base nestas informações, explique o motivo do 2-*t*-butil-1,3-butadieno ser mais reativo do que o 1,3-butadieno.

