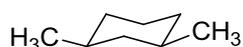


# QFL 0341- Estrutura e Propriedade de Compostos Orgânicos – 2016

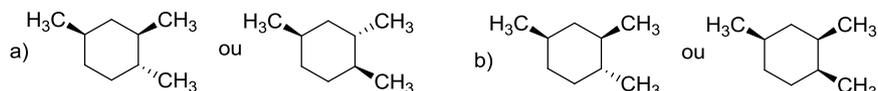
## Lista 05: Análise Conformacional

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

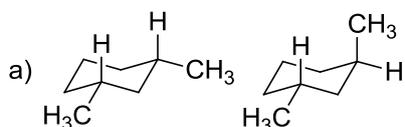


- A conformação cadeira apresentada acima representa o *cis*-1,3-dimetilciclo-hexano ou o *trans*-1,3-dimetilciclo-hexano?
- Desenhe a conformação cadeira alternativa deste isômero. Qual das duas possíveis conformações cadeira é a mais estável? Por quê?
- Desenhe a representação planar hexagonal do isômero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

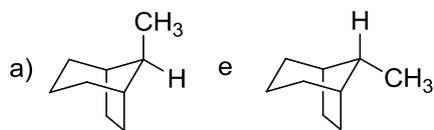
- Identifique o estereoisômero mais estável de cada um dos pares abaixo, explicando o porquê da sua escolha.



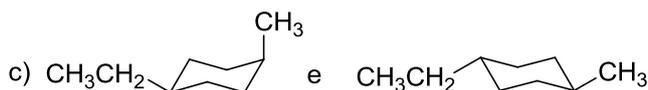
- Qual dos seguintes isômeros tem o menor calor de combustão? Justifique sua resposta.



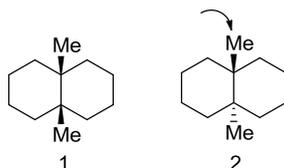
7. Determine se os pares de estruturas abaixo representam isômeros constitucionais, diferentes conformações do mesmo produto, ou estereoisômeros que não podem ser interconvertidos através de rotação ao redor de uma ligação.



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



8. 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.

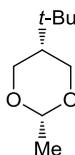
d) Indique um hidrogênio que esteja em *cis* com a metila indicada com a seta na estrutura **2**. Indique também um hidrogênio que esteja em *trans* com relação à mesma metila.

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

10. 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.



11. Avalie a conformação cadeira mais estável para cada uma das seguintes moléculas, dizendo qual delas deve ser a mais estável em cada caso.

a) 1,1-dimetilciclo-hexano

b) *cis*-1,4-dimetilciclo-hexano

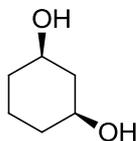
c) *trans*-1,4-dimetilciclo-hexano

d) *cis*-1-metil-4-*t*-butilciclo-hexano

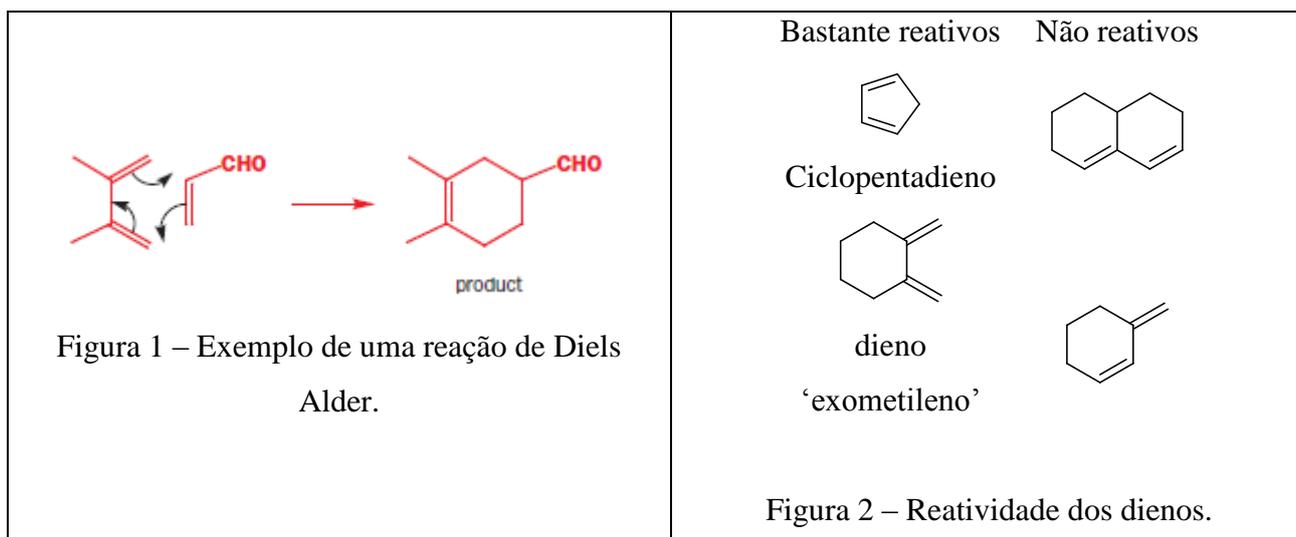
e) *cis*-1-fluoro-4-metilciclo-hexano

12. Desenhe a conformação cadeira mais estável para a 4-*t*-butilciclo-hexanona e para o 4-*t*-butil-1-metilidenociclo-hexano.

13. Em algumas situações a conformação mais estável não é aquela em que o substituinte está na posição equatorial. A molécula indicada a seguir é uma destas exceções. Proponha um possível motivo para isso. Inclua desenhos da estrutura na conformação adequada.



14. 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.



15. Desenhe a conformação mais estável dos compostos abaixo:

- a) Tetrahidropiran-2-ol
- b) Tetrahidropiran-3-ol
- c) *cis*-6-metiltetrahidropiran-2-ol
- d) *trans*-6-metiltetrahidropiran-2-ol
- e) 2-fluoro-1,3-dioxano
- f) *cis*-2,3-difluoro-1,4-dioxano
- g) *trans*-2,3-difluoro-1,4-dioxano

16. As piperidinas hidroxiladas (piperidin-2-ol, piperidin-3-ol e piperidin-4-ol) possuem algumas diferenças em relação ao equilíbrio conformacional. Em relação a isso:

- a) Desenhe a única conformação estável da piperidin-4-ol.
- b) Existem duas conformações estáveis para a piperidin-3-ol sendo que a mais estável solventes apróticos corresponde à aproximadamente 72% das moléculas. Em água este número cai para 7%. Desenhe ambos confôrmeros e justifique o fato acima citado.
- c) Existem duas conformações estáveis para a piperidin-2-ol sendo que a mais estável solventes apróticos corresponde à aproximadamente 77% das moléculas. Em água este número sobe para 95%. Desenhe ambos confôrmeros e justifique o fato acima citado.
- d) Explique as diferenças entre o piperidin-3-ol e o piperidin-2-ol em relação ao efeito da solvatação.