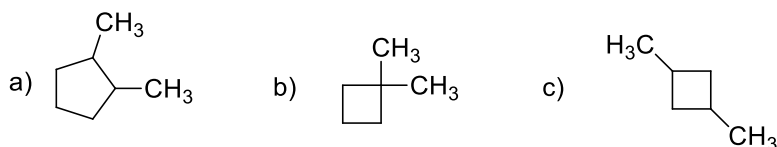
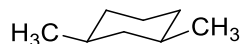


Lista 6: Análise Conformacional

- Desenhe na forma de cavalete as seguintes estruturas.
 - propano, na conformação alternada;
 - propano, na conformação eclipsada.
 - butano, anti;
 - butano, gauche.
- 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*.

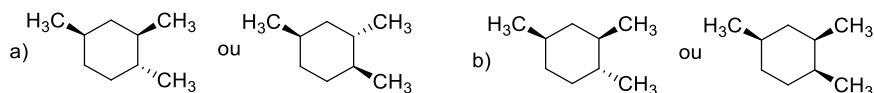


- Para a seguinte conformação cadeira do 1,3-dimetilciclo-hexano diga:

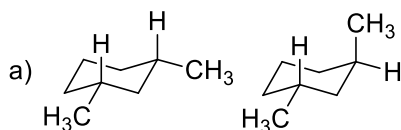


- A conformação cadeira apresentada acima representa o *cis*-1,3-dimetilciclo-hexano ou o *trans*-1,3-dimetilciclo-hexano?
- Desenhe a conformação cadeira alternativa deste isômero. Qual das duas possíveis conformações cadeira é a mais estável? Por quê?
- Desenhe a representação planar hexagonal do isômero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

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

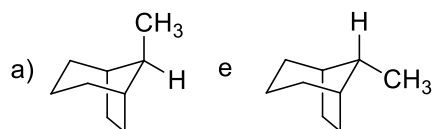


- 1-Metilciclo-hexeno é mais estável do que metilenociclo-hexano, mas metilenociclopropano é mais estável do que 1-metilciclopropeno. Explique.
- Qual dos seguintes isômeros tem o menor calor de combustão? Justifique sua resposta.

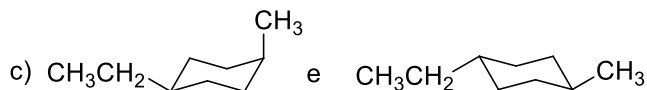


- Determine se os pares de estruturas abaixo representam isômeros constitucionais, diferentes conformações do mesmo produto, ou estereoisômeros que não podem ser interconvertidos através de rotação ao redor de uma ligação.

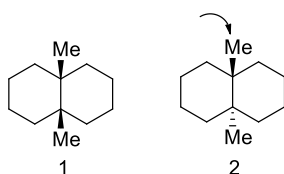
Lista 6: Análise Conformacional



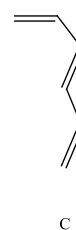
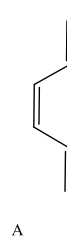
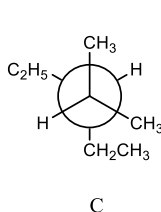
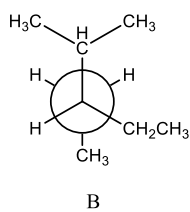
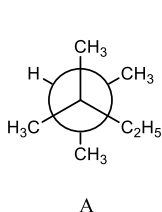
b) *cis*-1,2-dimetilciclopentano e *trans*-1,3-dimetilciclopentano



9. 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.
10. 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.
11. Em cada grupo, indique as estruturas que representam o mesmo composto.

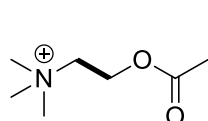


12. Coloque em ordem crescente de estabilidade os dois carbocátions abaixo. Justifique.

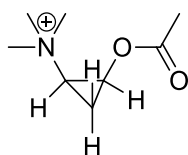


Lista 6: Análise Conformacional

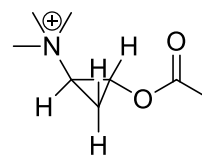
13. A acetilcolina é uma molécula flexível. Escreva as projeções na forma de cavalete para esta molécula mostrando as rotações da ligação C-C em negrito e explique porque as moléculas *cis*- (**A**) e *trans*-ciclopropano (**B**) são os análogos conformacionalmente rígidos da acetilcolina.



acetilcolina



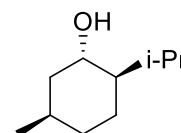
A



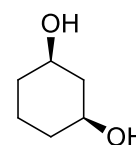
B

14. Mostre as conformações cadeira para cada uma das seguintes moléculas, indicando qual destas deve ser a mais estável.
- 1,1-dimetilciclo-hexano
 - cis*-1,4-dimetilciclo-hexano
 - trans*-1,4-dimetilciclo-hexano
 - cis*-1-metil-4-*t*-butilciclo-hexano
 - cis*-1-fluoro-4-metilciclo-hexano

15. Desenhe as duas conformações cadeira da molécula abaixo e discuta qual delas será mais estável.



16. 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.



17. A diferença de energia entre as conformações cadeira do metilciclo-hexano é de $1,7 \text{ kcal mol}^{-1}$, conforme discutido em sala de aula.
- No caso do fluorociclo-hexano este valor é de $0,25 \text{ kcal mol}^{-1}$. Discuta a diferença com relação ao dado do metilciclo-hexano.
 - Para os outros halociclo-hexanos os valores são $0,52$; $0,55$ e $0,46 \text{ kcal mol}^{-1}$, para Cl, Br e I, respectivamente. Esta tendência é a esperada? Discuta com base nos seus conhecimentos de química orgânica.

18. 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.

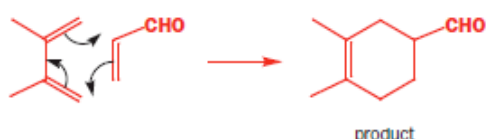


Figura 1: Exemplo de uma reação de Diels Alder.

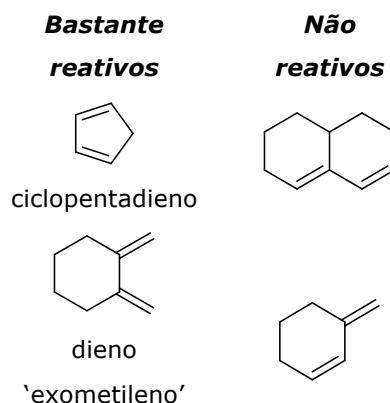
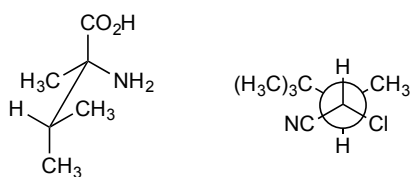


Figura 2: Reatividade dos dienos.

Lista 6: Análise Conformacional

22. Lembrando que a cadeia principal deve ser colocada no plano, desenhe cada uma das estruturas a seguir na forma de linha de ligação.



23. Desenhe a estrutura a seguir nas projeções de cavalete e de Newman.

