

QFL0341 - Estrutura e propriedades de compostos orgânicos

9ª lista (análises conformacionais)

1) Construa um diagrama de energia potencial qualitativo para os rotâmeros envolvendo a ligação C-C do 1,2-dibromoetano. Qual a conformação mais estável? Represente as conformações com os átomos de bromo em *anti* e *gauche*.

2) Um aumento no número de substituintes em torno de uma ligação resulta num aumento de tensão estérica. Analise os quatro compostos abaixo e represente as projeções de Newman para a ligação C2-C3 indicando quais são as conformações mais estáveis e a menos estáveis em cada caso. Compare as oito conformações e indique qual é a mais estável e a menos estável.

a) 2-metilbutano; b) 2,2-dimetilbutano; c) 2,3-dimetilbutano; d) 2,2,3-trimetilbutano.

Utilize a tabela abaixo para estimar o custo energético para cada caso (vide p. 119 McMurry; 5ª ed).

Interaction	Cause	Energy cost	
		(kJ/mol)	(kcal/mol)
H \leftrightarrow H eclipsed	Torsional strain	4.0	1.0
H \leftrightarrow CH ₃ eclipsed	Mostly torsional strain	6.0	1.4
CH ₃ \leftrightarrow CH ₃ eclipsed	Torsional plus steric strain	11	2.6
CH ₃ \leftrightarrow CH ₃ gauche	Steric strain	3.8	0.9

3) Represente a estrutura do cicloexano na conformação cadeira e indique todas as ligações em axial e equatoriais.

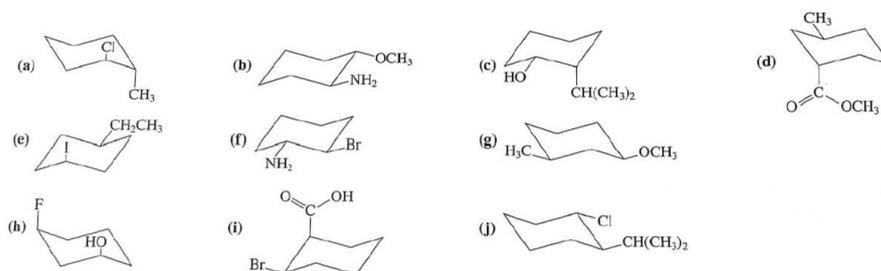
4) Desenhe as estruturas para as seguintes moléculas:

- a) *trans*-1-cloro-2-etil-ciclopropano; b) *cis*-1-bromo-2-cloro-ciclopentano;
c) 2-cloro-1,1-dietilciclopropano; d) *trans*-2-bromo-3-cloro-1,1-dietil-ciclopropano;
e) *cis*-1,3-dicloro-2,2-dimetilciclobutano; f) *cis*-2-cloro-1,1-difluoro-3-metil-ciclopentano.

5) Indique, para cada um dos derivados do cicloexano:

(i) se a molécula é um isômero *cis* ou *trans*;

(ii) se ela está na conformação mais estável (se não for o caso, represente qual seria a conformação mais estável).



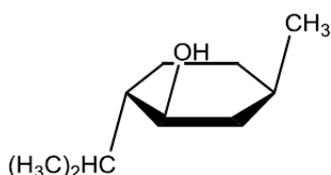
6) A conformação diaxial no *cis*-1,3-dimetilciclohexano é aproximadamente 23 kJ/mol (5,4 kcal/mol) menos estável do que a conformação diequatorial. Represente as duas conformações cadeira e sugira uma razão para a grande diferença de energia.

7) Identifique nos cicloexanos abaixo se os substituintes se encontram em axial ou equatorial.

a) 1,3-*trans* dissustituído; b) 1,3-*cis* dissustituído; c) 1,4-*trans* dissustituído; d) 1,4-*cis* dissustituído; e) 1,5-*trans* dissustituído; f) 1,5-*cis* dissustituído;

8) Represente as duas conformações em cadeira do *cis*-1-cloro-2-metilcicloexano e *trans*-1-cloro-2-metilcicloexano. Qual é a mais estável?

9) Qual das duas conformações em cadeira do mentol é a mais estável?

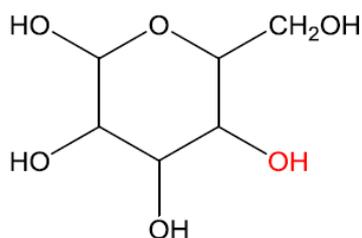


10) Desenhe o 1,3,5-trimetilcicloexano usando um hexano regular para representar o anel. Quantos isômeros *cis-trans* são possíveis? Qual é o mais estável?

11) Quantos estereoisômeros *cis-trans* são possíveis para o 1,2,3,4,5,6-hexaclorocicloexano? Qual é o mais estável?

12) Represente as duas conformações de cadeira para cada um dos compostos e indique qual a conformação mais estável: a) *cis*-1-*tec*-butil-3-metilcicloexano; b) *trans*-1-*tec*-butil-3-metilcicloexano; c) *cis*-1-*tec*-butil-4-metilcicloexano; e) *trans*-1-*tec*-butil-4-metilcicloexano;

13) O açúcar β -galactose, contém um anel de seis membros nos quais todos os substituintes estão em equatoriais, com exceção do grupo -OH (vermelho). Represente a β -galactose em sua conformação cadeira mais estável.



14) Qual isômero é mais estável entre a *cis*- e *trans*-decalina. Explique.