## Resolução da Lista de Exercícios 5- Análise conformacional

1. Indicar qual cicloexano é *Cis* ou *Trans*, e desenhar a estrutura do confôrmero mais estável.

02 Ligações de cima = Cis, o confôrmero mais estável terá o  $CO_2H$  em equatorial e o Cl em axial ( $CO_2H$  é um grupo maior, portanto tem maior energía quando em axial).

01 ligação de cima + 01 ligação de baixo = Trans, confôrmero mais estável terá os dois grupos em equatorial.

02 Lígações de címa = Cis, confôrmero mais estável terá os dois grupos em equatorial.

01 lígação de baixo + 01 lígação de cima = *Trans*, como já estão ambos os substituintes em equatorial, este já é o confôrmero mais estável.

01 ligação de baixo + 01 ligação de cima = *Trans*, como já estão ambos os substituintes em equatorial, este já é o confôrmero mais estável.

02 Ligações de cima = Cís, o grupo iso-butila que é mais energético já está em equatorial, portanto, este é o confôrmero mais estável.

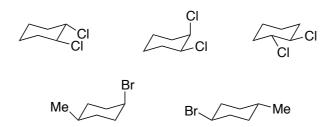
01 lígação de cima + 01 lígação de baixo = *Trans*, o confôrmero mais estável terá ambos os grupos em equatorial.



02 Ligações de cima = cis, o grupo terc-butila que é mais energético já está em equatorial, portanto, este é o confôrmero mais estável.

02 Lígações de cima = Cis, a iso-butila é o grupo mais energético e deve ficar em equatorial no confôrmero mais estável (o Cl ficaría em axial).

2. Indicar se os compostos são Cis ou Trans.



O primeiro composto é trans (S,S). O segundo é cis (meso: S, R). Os dois primeiros são diasteroisômeros. O terceiro é trans (R, R) e é diasteroisômero do segundo composto. Portanto o segundo composto é diasteroisômero de 1 e 3. Enquanto 1 e 3 são enantiômeros.

O quarto composto é cis e o quinto trans, eles são estereoisômeros.

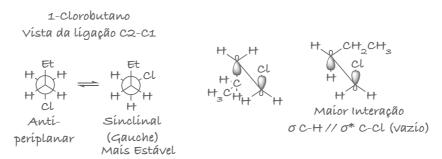
- **3.** Indicar usando a fórmula estrutural simplificada (cavalete) as moléculas nas conformações indicadas :
- a) butano eclipsada b) butano anti c) butano gauche

- 4. Indicar o ângulo diedro entre grupos metila na molécula de butano:
- a) antiperiplanar b) sinperiplanar c) sinclinal d) anticlinal

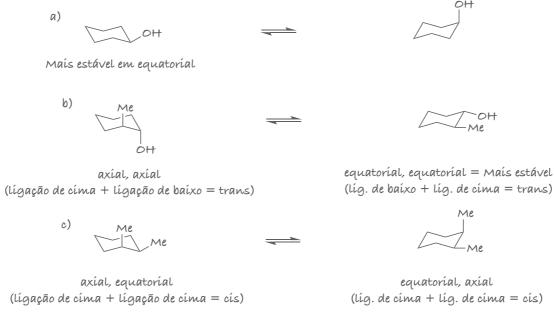
**5.** Indicar a conformação mais estável do 1,2,-dibromoetano, e o momento dipolar para esta conformação. Desenhar estruturas em cavalete e projeção de Newmam para a conformação mais estável.

A conformação antí é a mais estável e seu momento dipolar é zero (dipolos no sentido Br se anulam).

**6.** Considerando C1-C2, a forma gauche do 1-clorobutano é 1,3 KJ/mol mais estável que a anti. Explique.



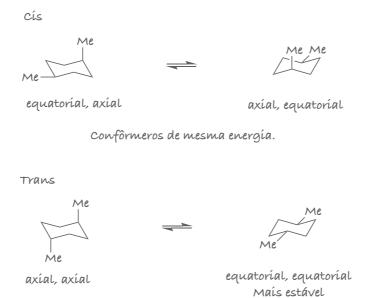
- 7. Indicar a conformação mais estável dos compostos abaixo:
- a) cicloexanol b) trans-metil-cicloexanol c) cis-1,2-dimetil-cicloexano



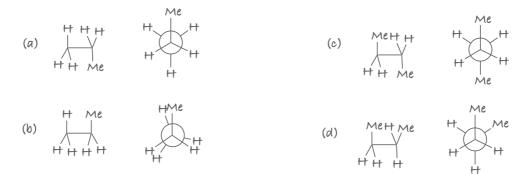
Os dois confôrmeros tem a mesma energía!

**8.** Usar projeção de Newman para indicar as conformações anti e gauche para: a) 1-bromo-2-cloroetano e b) ácido 3-hidróxipropanóico. Qual é a conformação mais estável?

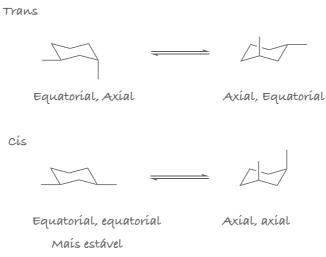
**9.** Indicar as estruturas *cis* e *trans* do 1,4-dimetilcicloexano. Em cada caso indicar o confôrmero mais estável.



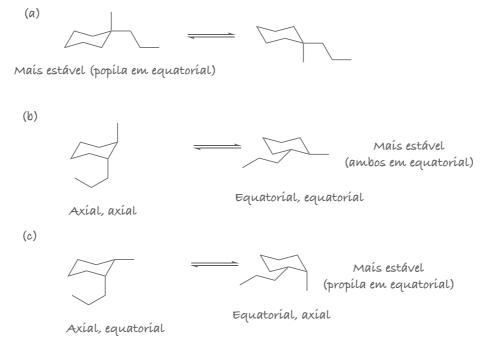
- 10. Desenhar as fórmulas de cavalete (estendida) e Projeção de Newman para:
- a) Propano alternado
- b) Propano eclipsado
- c) Butano antiperiplanar
- d) Butano gauche ou sinclinal



- 11. Considerar a conformação em cadeia do trans-1,3-dimetil-cicloexano.
- a) indicar o isômero geométrico
- b) Indicar o confôrmero mais estável (considerando os confôrmeros cis e trans)



- 12. Desenhar as conformações mais estáveis para:
- a) 1-metil-1-propil cicloexano
- b) Trans-1-metil-2-propil cicloexano
- c) Cis-1-metil-2-propil cicloexano



**13.** Desenhar a projeção de Newman da conformação mais estável que resulta da rotação em torno da ligação C2-C3 em 2,3-Dimetil-butano?

$$H_3C$$
 $H_3C$ 
 $CH_3$ 
 $CH_3$ 

**14.** Desenhe a conformação mais estável de cis-1-isopropil-2-metilcicloexano.

- **15.** Em cicloalcanos, qual a relação entre substituintes em planos diferentes? a) Confôrmeros
- b) cis
- c) trans
- d) isômero E
- e) isômero Z

Resposta: C

**16.** Descrever a origem da tensão angular e da tensão torsional presente no ciclopropano.

A tensão angular decorre da compressão do ângulo ídeal da lígação tetraédrica de 109,5° para 60°. A grande tensão de torção ocorre pela ínteração das lígações C-H em carbonos adjacentes.

17. Identifique os alcanos correspondentes as estruturas abaixo (Newman e cavalete):

18. Desenhe a conformação mais estável da seguinte substância: