



E291

ESTUDO DO ISOMERISMO ROTACIONAL EM HALODESIL DERIVADOS

Daniela Regina Antonicelli (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Roberto Rittner (Orientador), Instituto de Química – IQ, UNICAMP

No presente trabalho foram realizados os estudos do isomerismo rotacional, empregando a espectroscopia no infravermelho juntamente com os cálculos teóricos de orbitais moleculares, para dois haloderivados da deoxibenzoína, a clorodesil e a bromodesil. Os cálculos mostraram que tanto a clorodesil como o bromodesil apresentam três rotâmeros estáveis (*cis*, *gauche-1* e *gauche-2*) na fase vapor, porém dois deles (*gauche-1* e *gauche-2*) apresentam praticamente a mesma energia. Os espectros na região do infravermelho em solventes de diferentes polaridades para o estiramento do grupo carbonila, apresentaram duas bandas, quando era esperado três, pois existem três formas estáveis. Cálculos de frequência vibrational para cada um dos rotâmeros foram realizados, e foi constatado que dois dos rotâmeros (*gauche-1* e *gauche-2*) apresentam frequências de estiramento do grupo carbonila praticamente iguais. Ou seja, não é possível distinguir estes dois rotâmeros em solução, e portanto, a análise conformacional foi realizada admitindo que *gauche-1* e *gauche-2* são iguais e portanto o sistema apresenta apenas duas formas estáveis *cis* e *gauche*. Para a clorodesil as formas *gauche* estão presentes no equilíbrio com cerca de 80% em todos os solventes estudados ao passo que para a bromodesil esta quantidade aumenta para 85 em CCl₄, 90% em CHCl₃ e 100% em CH₂Cl₂ e CH₃CN.

Isomerismo rotacional - Infravermelho - Cálculos teóricos