



E0456

A ESPECTROSCOPIA DE RMN DE ^1H APLICADA NA MODELAGEM DO SISTEMA DE ISÔMEROS ROTACIONAIS PARA 3-X-2-METILPROPANOATOS DE METILA (X = BR, CL, I)

Paula Gimenes (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Roberto Rittner Neto (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Compostos halogenados são importantes intermediários na indústria química e farmacêutica. Neste trabalho investiga-se o comportamento conformacional de três compostos 3-X-2-metilpropanoatos de metila (X = Cl, Br, I), buscando avaliar os efeitos dos substituintes e da variação dos solventes na estabilidade dos isômeros rotacionais. Os compostos foram obtidos através da reação de adição antimarkovnikov do ácido de halogênio anidro ao metacrilato de metila. Os parâmetros obtidos em experimentos de RMN, em especial a constante de acoplamento, associados a cálculos de energia na fase vapor e líquida e J teóricos são variáveis importantes para estimar a proporção relativa entre os isômeros em solução. Foram observadas variações das constantes de acoplamento $^3J_{\text{HH}}$, atribuídas a mudanças na relação populacional entre conformêros derivados principalmente da rotação na ligação entre o carbono β -carbonila ligado ao halogênio e o carbono α -carbonila. No infravermelho, a leve assimetria observada para as bandas de vibração da carbonila nos vários solventes sugere que esteja ocorrendo equilíbrio conformacional também entre isômeros resultantes da rotação entre o carbono α -carbonila e a carbonila.

RMN - Isomerismo rotacional - Compostos carbonílicos