

E402

### ESTUDO CONFORMACIONAL DO TRANS-2-CLORO-1-BROMOCICLOEXANO

Celina Morimoto Tani, Prof. Dr. Paulo Roberto de Oliveira (Co-orientador) e Prof. Dr. Roberto Rittner (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O comportamento conformacional dos cicloexanos 1,2-dissubstituídos tem sido explicado principalmente em termos estéricos envolvendo os grupos substituintes. O objetivo deste trabalho é verificar o comportamento do equilíbrio conformacional do *trans*-2-cloro-1-bromocicloexano em diferentes solventes, para verificar qual efeito estérico é predominante, o *gauche* ou o *syn*-1,3-diaxial. Através do estudo do efeito do solvente, utilizando os valores de fração molar ( $X_{ee}$ ) obtidos das constantes de acoplamento  ${}^3J_{H,H}$  calculados pelo programa PCModel para os conformeros diaxial ( ${}^3J_{aa}$ ) e diequatorial ( ${}^3J_{ee}$ ), separadamente, associados aos valores de  ${}^3J_{obs}$  experimentais, pôde-se verificar que a proporção do conformero diequatorial aumenta de 26% em  $CCl_4$  para 76% em DMSO. Estes resultados mostram que o conformero mais polar (diequatorial) é favorecido em solventes polares, e que apesar dos grupos substituintes serem volumosos, o efeito *gauche* é minimizado devido a estabilização dipolar provocada pelos solventes mais polares. O valor de  $\Delta E=1,59$  kcal/mol obtido pelo método Hartree Fock, com o conjunto de base 6-31g(d,p), mostra que, no vácuo, a proporção do conformero diaxial é de 94% no equilíbrio, indicando que quando não há a presença do solvente, o efeito repulsivo *gauche* é predominante.

Análise Conformacional - Efeito do Solvente - RMN de  ${}^1H$