

E403

EFEITO DA CONCENTRAÇÃO E DO SOLVENTE NO EQUILÍBRIO CONFORMACIONAL DO CIS-3-ETÓXICICLOEXANOL

Danilo Santos Ortiz, Prof. Dr. Paulo Roberto de Oliveira (Co-orientador) e Prof. Dr. Roberto Rittner (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O objetivo deste trabalho é verificar como a ligação de hidrogênio influencia o equilíbrio conformacional do *cis*-3-etoxicicloexanol (*cis*-3-*EtOH*), em diferentes concentrações (em CDCl_3) e diferentes solventes. O estudo do efeito da concentração mostrou que a proporção do conformero diequatorial aumenta de 41 para 45% no equilíbrio, com o aumento da concentração de 0,05 para 0,40 mol L^{-1} . Esta variação é menor do que a ocorrida para o composto análogo estudado em nosso laboratório (*cis*-3-metóxicicloexanol), porque o *cis*-3-*EtOH* faz uma ligação de hidrogênio intramolecular mais forte. Analisando o estudo do efeito do solvente, pode-se observar com base nos valores X_{ee} que o conformero diaxial é predominante em solventes apolares, por fazer ligações de hidrogênio intramoleculares, mas o conformero diequatorial passa de 37% em CCl_4 para 97% em DMSO, visto que este interage mais facilmente com as moléculas de solvente pôr ser menos estericamente impedido que o conformero diaxial. O aumento da proporção do diequatorial segue a ordem da basicidade do solvente, fato este observado pela primeira vez em estudos de análise conformacional.

RMN de ^1H - Análise Conformacional - Ligação de Hidrogênio Intramolecular