

E404

INFLUÊNCIA DAS INTERAÇÕES HIPERCONJUGATIVAS NO ACOPLAMENTO $^1J_{CH}$ EM 1,3 DIOXOLANO E 1,3 DITIOLANO. ESTUDO TEÓRICO E EXPERIMENTAL

Viviane Karcher (Bolsista CNPq), Cláudio Francisco Tormena (Co-Orientador) e Prof. Dr. Roberto Rittner (Orientador), Instituto de Química – IQ, UNICAMP

A constante de acoplamento indireto spin-spin a uma ligação, em especial $^1J_{CH}$, é uma ferramenta importante para estudos de efeitos estereoeletrônicos hiperconjugativos. Cálculos teóricos de constantes de acoplamento vem sendo utilizados para elucidar as interações entre os spins nucleares e o sistema eletrônico no caminho do acoplamento. As Interações hiperconjugativas foram estudadas nos compostos 1,3-dioxolano e 1,3-ditiolano, através do método B3LYP para calcular as geometrias, as energias e as constantes de acoplamento $^1J_{CH}$, que foram obtidas através da teoria FPT e o método B3LYP. Os resultados dos cálculos foram comparados com medidas experimentais do acoplamento $^1J_{CH}$. A análise conjunta dos dados teóricos e experimentais mostram que a interações predominantes são $n_O \rightarrow \sigma^*_{CH}$ e $n_S \rightarrow \sigma^*_{CH}$, para os respectivos compostos, sendo oposto ao observado para os anéis heterocíclicos de seis membros, evidenciando que pequenas mudanças na estrutura molecular causam profundas alterações na estrutura estereoeletrônica.

Interações Hiperconjugativas - Constantes de Acoplamento - Cálculos Teóricos