

E401

ESTUDO CONFORMACIONAL DE *TRANS* – 2 – HALOCICLOPENTANÓIS POR RMN E CÁLCULOS TEÓRICOS

Jacqueline Cristine Tolentino Temistocles (Bolsista PIBIC/CNPq), Fabiana Yoshinaga (Co-orientador) e Prof. Dr. Roberto Rittner (Orientador), Instituto de Química – IQ, UNICAMP

A análise conformacional de compostos com anéis de cinco membros tem sido pouco estudada devido à sua rápida interconversão entre os muitos confôrmeros. Anéis de cinco membros estão presentes em inúmeros compostos de interesse biológico como carboidratos, ácidos nucleicos, etc. Este trabalho descreve os resultados obtidos para o equilíbrio conformacional de *trans*-2-halociclo-pentanóis (halo=cloro e bromo), utilizando a constante de acoplamento $^3J_{HH}$, em diferentes solventes e cálculos teóricos. Foi realizada uma otimização das geometrias e das energias dos possíveis confôrmeros utilizando o método B3LYP/6-311++G(d,p) com o programa GAUSSIAN98. Os cálculos forneceram apenas uma geometria estável. Obteve-se os espectros de RMN de 1H em diferentes solventes. Verificou-se que a constante de acoplamento $^3J_{HH}$ não apresenta uma variação significativa com a polaridade do solvente, sugerindo a existência de apenas uma conformação estável, como obtido pelos cálculos teóricos. Estes resultados foram confirmados pelos espectros obtidos na região do infravermelho em vários solventes, que apresentaram apenas uma banda para o estiramento C – O.

Análise Conformacional - RMN - *trans* – 2 – halociclo-pentanóis