



E292

ESTUDO CONFORMACIONAL DE α -HALOTETRALONAS POR RMN E CÁLCULOS TEÓRICOS

Paulo Raphael dos Santos Ferro (Bolsista SAE/PRG) e Prof. Dr. Roberto Rittner (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Compostos carbonílicos α -heterossustituídos são de grande importância em sínteses orgânicas, bem como em sistemas biológicos. O fragmento C(O)-CX (X=heteroátomo) apresenta propriedades aparentemente anômalas devido a interações dipolo-dipolo, estéricas e de orbitais entre o heteroátomo e o grupo carbonila. Este trabalho apresenta estudos sobre o equilíbrio conformacional em α -halo-1-tetralonas (halo=cloro e bromo) utilizando a constante de acoplamento $^3J_{HH}$ em diferentes solventes, cálculos teóricos e a teoria de solvatação. Foi realizado uma otimização das geometrias e das energias dos confôrmeros axial e equatorial utilizando o método HF/6-311+g(d,p) com o programa GAUSSIAN98. Essas geometrias foram introduzidas no programa MODELS, o qual forneceu os parâmetros necessários para obtenção das energias de solvatação. Obteve-se os espectros de RMN de 1H em diferentes solventes, verificando-se que o acoplamento $^3J_{HH}$ apresenta uma variação significativa com o solvente, a qual foi atribuída à mudança na população dos confôrmeros com o solvente. Os valores do acoplamento $^3J_{HH}$ juntamente com os parâmetros da teoria de solvatação foram introduzidos no programa BESTFIT, obtendo-se os valores de diferença de energia na fase vapor e os melhores valores de $^3J_{HH}$ para os rotâmeros individuais e as populações dos confôrmeros em diferentes solventes.

Análise conformacional - RMN - Halotetralonas