



E448

EQUILÍBRIO CONFORMACIONAL DE CIANOACETAAMIDA POR RMN E CÁLCULOS TEÓRICOS

Flávio O. Silva (Bolsista PIBIC/CNPq), Lucas C. Ducati (PG) e Prof. Dr. Roberto Rittner Neto (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O presente trabalho relata uma investigação conformacional da cianoacetamida por RMN e cálculos teóricos. A escolha desse composto foi motivada pelo escasso número de trabalhos conformacionais de pseudo-haletos encontrados na literatura. Um desses trabalhos, NETA relata o estudo conformacional de compostos α -ciano acetatos por RAMAN, IR e cálculos teóricos no qual foram encontrados dois rotâmeros (cis e trans), na fase líquida e vapor. Resultados de cálculos ab initio para a cianoacetamida obtidos pelo GAUSSIAN03W usando um nível teórico de B3LYP/6-31G(d,p), mostraram a presença de apenas um conformero (trans). As constantes de acoplamento experimentais obtidas do espectro de ^{13}C em acetona- d_6 , CD_3CN e $\text{DMSO}-d_6$, mostraram nenhuma dependência com a polaridade do solvente, confirmando a existência de apenas um conformero em solução. Entretanto foi observado um acoplamento a longa distância $^3J_{\text{C}(\text{CH}_2)\text{H}(\text{NH}_2)}$ (8,9 Hz) no sinal tripleto do CH_2 . Espectros de NOESY e HMBC permitiram a identificação do hidrogênio amídico que participa deste acoplamento peculiar. Cálculos de *Natural Bonding Orbital* (NBO), deslocamentos químicos e constantes de acoplamento mostraram que o hidrogênio amídico antiperiplanar ao carbono metilênico que está em campo alto participa do acoplamento $^3J_{\text{CH}}$, através da hiperconjugação dos orbitais $\sigma_{\text{N-H}}$ e $\sigma_{\text{Csp}^2 - \text{Csp}^3}^*$ ($E=1,81 \text{ kcal mol}^{-1}$).

Cianoacetamida - Análise conformacional - Constantes de acoplamento