



E0615

INTERAÇÕES ESTEREOELETRÔNICAS E SEUS EFEITOS NA PREFERÊNCIA CONFORMACIONAL DE HALOIDRINAS- E DIHALO- DERIVADOS DO 3-CARENO

Thaís Mendonça Barbosa (Bolsista FAPESP) e Prof. Dr. Roberto Rittner Neto (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Carenos são monoterpênicos que apresentam extrema importância do ponto de vista sintético. Assim, estudou-se a estabilidade conformacional do 4-cloro- e 4-bromo-4,7,7-trimetil-biciclo[4.1.0]-3-heptanol (haloidrinas derivadas do 3-careno), bem como, do 3,4-dicloro- e 3,4-dibromo-3,7,7-trimetil-biciclo[4.1.0]heptano, através das Espectroscopias de Ressonância Magnética Nuclear e no Infravermelho, apoiadas por cálculos teóricos da estrutura eletrônica. Realizou-se a síntese dos compostos propostos e após purificação obteve-se os espectros de RMN de ^1H , ^{13}C , DEPT-135, HSQC e NOESY para caracterização dos compostos. Os cálculos teóricos foram efetuados com a teoria do funcional de densidade (DFT) com o método híbrido B3LYP e teoria ab initio com o método MP2, empregando as funções de base do tipo aug-cc-pVDZ disponível no pacote Gaussian03, para a determinação das energias e geometrias dos conformeros mais estáveis na fase vapor. Realizou-se também um estudo da estrutura eletrônica, dos conformeros mais estáveis, através da análise dos orbitais naturais de ligação (NBO) e QTAIM para verificar quais interações estereoeletrônicas são responsáveis pela estabilidade conformacional. A análise conjunta de todos esses dados permitiu verificar quais são os fatores responsáveis pela estabilidade conformacional dos compostos em estudo.

Cálculos teóricos - Estudo conformacional - RMN