



E0593

INTERAÇÕES ESTEREOELETRÔNICAS E A PREFERÊNCIA CONFORMACIONAL EM N-ÓXIDO

Mauricio Malto de Oliveira (Bolsista SAE/UNICAMP) e Prof. Dr. Roberto Rittner Neto (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Estudos de análise conformacional de anéis de seis membros contendo átomos de nitrogênio são escassos e nenhum deles havia explicado a estabilidade conformacional em termos de interações hiperconjugativas. Nosso grupo de pesquisa realizou um estudo teórico sobre derivados destes azacicloexanos. O objetivo deste trabalho foi estender este estudo analisando a estabilidade conformacional de *N*-óxido de azacicloexanos, utilizando espectroscopia de RMN e cálculos teóricos. Foram sintetizados *N*-óxidos de metilpiperidina e *N,N*-dióxidos de 1,4-*N,N*-dimetilpiperazina e de 1,3-*N,N*-dimetilpiperazina e obtidos os espectros de RMN de ^1H e ^{13}C , e foi determinado a energia relativa de seus confôrmeros utilizando o programa GAUSSIAN 03. Para o *N*-óxido de *N*-metilpiperidina o confôrmero mais estável apresenta diferença de energia de $2,5 \text{ kcal.mol}^{-1}$, indicando a presença de apenas uma conformação estável, com o átomo de oxigênio na posição *axial*. Para os dióxidos de *N,N*-dimetilpiperazina os confôrmeros mais estáveis também apresentou os dois oxigênios na posição *axial*.

Análise conformacional - Interações eletrônicas - Cálculos teóricos