



XVI congresso interno de iniciação científica

Ginásio Multidisciplinar da Unicamp
24 a 25 de setembro de 2008



E0522

ESTUDO DO EQUILÍBRIO CONFORMACIONAL DO CLORO-SILACICLOEXANO ATRAVÉS DA RMN E CÁLCULOS TEÓRICOS

Amanda Rossetti (Bolsista FAPESP), Francisco P. dos Santos e Prof. Dr. Claudio Francisco Tormena (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

A Análise Conformacional abrange dois aspectos: determinação da estrutura molecular e energia relativa de cada confôrmero e encontrar quais forças controlam a estabilidade de uma conformação frente outra, ou seja, por que uma conformação é estável e outra não. O objetivo deste trabalho é estudar o equilíbrio conformacional para o Cloro-Silacicloexano através de RMN e cálculos teóricos. Para isto, o composto foi sintetizado e os espectros de RMN foram obtidos. Todos os cálculos teóricos foram realizados utilizando o programa GAUSSIAN03. Os cálculos de otimização mostraram que o confôrmero axial é 0,8 kcal mol⁻¹ mais estável que o confôrmero equatorial, fornecendo uma população de 79,3% do confôrmero axial. Para tentar explicar esse comportamento conformacional foram feitos cálculos de NBO (Natural Bond Orbital). A análise desses cálculos mostrou que as interações hiperconjugativas exercem um pequeno efeito na estabilidade do confôrmero axial, pois as energias das interações dos dois confôrmeros são semelhantes. Conclui-se que o Cloro-Silacicloexano tem comportamento conformacional inverso ao do Clorocicloexano e que as interações hiperconjugativas não são a principal regra na estabilidade conformacional observada.

Análise conformacional - RMN - Silício