



XVI congresso interno de iniciação científica

Ginásio Multidisciplinar da Unicamp  
24 a 25 de setembro de 2008



E0523

**ESTUDO CONFORMACIONAL EM TRANS-CICLOEXANOS 1,2-DIHALOSSUBSTITUÍDOS, ATRAVÉS DE RMN E CÁLCULOS TEÓRICOS**

Raphael Bellis de Sousa, Thiago Pinheiro da Silva, Prof. Dr. Álvaro Cunha Neto (Co-orientador) e Prof. Dr. Claudio Francisco Tormena (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

A configuração em derivados do cicloexano, o qual dois substituintes podem ocupar as posições axial ou equatorial, é um dos mais importantes tópicos de estudos de estereoquímica relativa de compostos cíclicos, especialmente no caso de cicloexanos trans-1,2 dissustituídos. Nosso grupo de pesquisa tem reportado uma série de estudos a respeito do equilíbrio conformacional em cicloexanos trans-1,2-dissustituídos utilizando dados de espectros de RMN a baixa temperatura e cálculos teóricos. Neste trabalho, foi realizada a análise conformacional dos derivados trans-dihalogenados do cicloexano através de RMN, cálculos teóricos de constante de acoplamento e análise NBO. Este método consiste na determinação da constante de acoplamento entre H1 e H2 ( $^3J_{H_1H_2}$ ) em diferentes solventes, sem o recurso de derivados rígidos. As análises de NBO foram aplicadas com o intuito de se obter as energias envolvidas nas interações dos orbitais (interações hiperconjugativas) e avaliar quais interações são responsáveis pela estabilidade conformacional. Através das análises destas interações é possível explicar os resultados experimentais dos compostos estudados.

Conformação - RMN - DFT