



E0511

INTERAÇÕES ESTEREOELETRÔNICAS E SEUS EFEITOS NA PREFERÊNCIA CONFORMACIONAL EM N-ÓXIDO DE AZACICLOEXANOS

Mauricio Malto de Oliveira (Bolsista SAE/UNICAMP) e Prof. Dr. Claudio Francisco Tormena (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 é 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 de dimetilpiperazina e obtidos os espectros de RMN de ^1H e ^{13}C , e foi determinado a energia relativa de seus conformeros utilizando o programa GAUSSIAN 03. Para o *N*-óxido de *N*-metilpiperidina o conformero 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 o 1,4-dióxido de *N,N*-dimetilpiperazina o conformero mais estável também apresentou os dois oxigênios na posição *axial*.

Análise conformacional - Interações de orbitais - N-óxidos