



E0568

### **INTERAÇÃO TRANSANULAR ENTRE O GRUPO CARBONILA E O ÁTOMO DE NITROGÊNIO NO ESTADO FUNDAMENTAL E IV E CÁLCULOS TEÓRICOS**

Gabriela Fantinato Pereira (Bolsista IC CNPq), Francisco Paulo dos Santos e Prof. Dr. Roberto Rittner Neto (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O estudo de interações transanulares no estado fundamental, entre a carbonila e o nitrogênio diametralmente opostos é um problema clássico em Química Orgânica, tendo sido abordado em inúmeras publicações. O presente trabalho relata um primeiro estudo dessas interações através de cálculos teóricos em aminocetonas e aminoaciloinas cíclicas. Para obtenção de dados experimentais está sendo realizada a síntese de um composto modelo, 1-isopropil-1-azacliclononan-5-ol-6-ona, partindo-se da  $\gamma$ -butirolactona para gerar o 4-hidroxibutirato de etila, seguida da substituição do grupo hidroxila por iodo para formar o 4-iodobutirato de etila. Este com isopropilamina dará origem ao  $\gamma$ ,  $\gamma'$ -isopropilimino-bis-butirato de dietila, o qual por reação intramolecular fornecerá o 1-isopropil-1-azacliclononan-5-ol-6-ona. A síntese se encontra em andamento. Paralelamente, estão sendo realizados cálculos teóricos para o composto modelo e para os demais compostos, utilizando o programa GAUSSIAN 03 em nível B3LYP, empregando o conjunto de bases aug-cc-pVDZ. Os cálculos de frequência da carbonila apresentaram um menor valor para os compostos nos quais os substituintes ligados ao nitrogênio eram menores, no caso da aminocetona de 7 membros, indicando uma maior interação transanular, em concordância com os dados experimentais da literatura.

RMN - Cálculos teóricos - Análise conformacional