

Programa Institucional de Bolsas
de Iniciação Científica PIBIC

23 a 25
outubro

Pró-Reitoria de Pesquisa - Pibic/CNPq
Pró-Reitoria de Graduação - SAE/Unicamp



E0623

INTERAÇÕES ESTEREOELETRÔNICAS E SEUS EFEITOS NA PREFERÊNCIA CONFORMACIONAL DE 3-HIDROXI- E 3-METOXI-TETRAIDROPIRANOS

Daniela Coelho Solha (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Claudio Francisco Tormena (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O projeto baseia-se no estudo da estabilidade conformacional do 3-hidroxi-tetraidropirano através de Ressonância Magnética Nuclear e no Infravermelho. Apoiados em cálculos teóricos, os quais foram efetuados com a teoria do funcional de densidade(DFT) com o método híbrido B3LYP e teoria *ab initio* com o método MP2, empregando as funções de base do tipo aug-cc-pVTZ disponível no Gaussian09, para determinação das energias e geometrias dos conformeros mais estáveis. Também foi realizado o estudo através da análise dos orbitais naturais de ligação (NBO) e QTAIM para verificar interações estereoeletrônicas responsáveis pela estabilidade conformacional. Analisando os dados obtidos, pode-se observar que as conformações *axial* e *equatorial* do 3-hidroxi-tetraidropirano encontram-se em equilíbrio, o qual é deslocado no sentido do *equatorial* de acordo com o aumento da polaridade do solvente utilizado. Esta maior estabilidade não pode ser explicada pelo momento de dipolo, pois as duas conformações apresentam valores muito semelhantes. Assim, essa preferência pode ser atribuída a quebra da ligação de hidrogênio na conformação *axial* em solventes polares, bem como a melhor solvatação da conformação *equatorial*.

Análise conformacional - Interações estereoeletrônicas - RMN