

A. Ciências Exatas e da Terra - 4. Química - 7. Química Orgânica

Investigação sobre a estabilidade conformacional de trans-1-alcóxi-2-bromocicloexanos (alcóxi = metoxila, etoxila, i-propoxila e t-butoxila)

Josué M. Silla¹

Marilua A. Moreira²

Matheus Puggina de Freitas³

1. Graduando
2. Graduando
3. Prof. Dr.- DQI/UFLA-Orientador

RESUMO:

Utilizando métodos semi-empírico AM1 (Austin Model 1) e DFT em nível B3LYP/6-31G(d,p), este trabalho teve como objetivo estudar os mecanismos que governam o equilíbrio conformacional de trans-1-alcóxi-2-bromocicloexanos, tendo como substituintes alcóxila os grupos OMe, OEt, OiPr e OtBu. Foi realizada uma investigação computacional comparativa da existência de efeitos estéricos e eletrostáticos na estabilidade dos mesmos, ao passo que não se encontram na literatura trabalhos relacionados a esses compostos. O trabalho foi desenvolvido seguindo uma ordem comumente utilizada por químicos teóricos, onde previamente construiu-se uma superfície de energia potencial (PES) com subsequente otimização dos mínimos obtidos. Os resultados teóricos foram comparados com os experimentais através de espectros no infravermelho, com base nos valores de frequências; também foram calculados os percentuais dos conformeros pela intensidade das bandas de estiramento C-Br. O conformero mais estável para o OMe apresentou um ângulo diedro (torção) H-C-O-C de 35.30° em posição diequatorial; para o OEt, os ângulos diedros, H-C-O-C, C-O-C-C foram de 30.38° e 182.03° respectivamente, em posições diequatoriais; para o OiPr, H-C-O-C, C-O-C-H de 358.6° e 316.89° respectivamente, também em posições diequatoriais; e para o OtBu, o conformero mais estável teve ângulo diedro H-C-O-C de 4.40° em posição diaxial. Em princípio, a repulsão estérica e eletrostática entre Br e os substituintes OMe, OEt e OiPr no conformero diequatorial mostrou ser menos importante do que repulsões 1,3-diaxiais, enquanto que para o derivado OtBu, as repulsões 1,3-diaxiais predominam sobre as repulsões gauche existentes no conformero diequatorial, conduzindo à maior estabilidade da forma diaxial. Análises NBO vêm sendo desenvolvidas para avaliar a contribuição hiperconjugativa nos equilíbrios conformacionais.

Instituição de Fomento: FAPEMIG

Palavras-chave: equilíbrio conformacional, repulsão estérica, repulsão eletrostática.