



## SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2016
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Estudo e Desenvolvimento de Estratégia para Determinação de Constante de Acoplamento $\eta_{JCH}$
<b>Autor</b>	EDUARDA SANGIOGO GIL
<b>Orientador</b>	FRANCISCO PAULO DOS SANTOS

# Estudo e Desenvolvimento de Estratégia para Determinação de Constante de Acoplamento ${}^nJ_{CH}$

Aluna: Eduarda Sangiogo Gil

Orientador: Prof. Dr. Francisco Paulo dos Santos

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é certamente uma das técnicas instrumentais mais poderosas para a análise da configuração relativa de compostos em solução. A aplicação de técnicas de RMN na determinação da orientação espacial relativa de substituintes tem se tornado, em certas classes de compostos complexos, rotina nos laboratórios modernos de química orgânica. A análise da conformação e da estereoquímica de compostos orgânicos é atualmente de fácil determinação devido aos avanços recentes na espectroscopia de RMN, é possível medir constantes de acoplamento a longa distância ( ${}^nJ_{CH}$ ), tornando a RMN uma poderosa ferramenta para estes tipos de estudos.

O acoplamento nuclear indireto spin-spin ( $J$ ) entre dois núcleos magneticamente ativos é transmitido através dos elétrons das ligações e, portanto, é chamado de interação acoplada de elétrons. A magnitude da constante de acoplamento pode ser afetada por inúmeros fatores, como por exemplo, os comprimentos ou ângulos de ligação, a conformação e configuração molecular, a orientação dos substituintes ou dos pares de elétrons livres, a hibridização e a eletronegatividade dos átomos acoplados, dos átomos ligados aos núcleos acoplados e dos núcleos que participam das ligações por onde se transfere a informação, etc. Várias relações entre fatores estruturais e conformacionais de uma molécula têm sido estabelecidas nas últimas cinco décadas. A mais conhecida delas é a curva de Karplus, que correlaciona o valor do acoplamento vicinal  ${}^3J_{(H,H)}$  e  ${}^3J_{(C,H)}$  entre os núcleos em um fragmento molecular H-C-C-H ao ângulo diedro entre esses átomos.<sup>2</sup>

Porém para alguns compostos estudados como o  $\alpha$ -pineno,  $\beta$ -pineno e seus derivados a constante de acoplamento  ${}^3J_{CH}$  não está obedecendo à curva de Karplus, onde moléculas com ângulos diedros muito semelhantes apresentam acoplamentos  ${}^3J_{CH}$  muito diferentes. Assim, foi visto que algumas interações hiperconjugativas explicam a assimetria das constantes de acoplamento para as moléculas estudadas. A partir disto foram realizados cálculos teóricos de otimização, de constante de acoplamento  ${}^3J_{CH}$  e para a obtenção das energias de deslocalização entre os orbitais ligantes e antiligantes (interações hiperconjugativas) foi utilizada a análise de NBO (Natural Bond Orbital). A medida experimental das constantes de acoplamento heteronucleares foram realizadas com a sequência de pulso HSQC-TOCSY (IPAP).

1. J. R. Tolman, J. H. Prestegard, *J. Magn. Reson. B* 112

2. Hore, P. J. *Nuclear Magnetic Resonance*; Oxford Science Publication: New York, 1995.