



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2015
<b>Local</b>	Porto Alegre - RS
<b>Título</b>	Estudo e Determinação de Constante de Acoplamento 3JCH
<b>Autor</b>	EDUARDA SANGIOGO GIL
<b>Orientador</b>	FRANCISCO PAULO DOS SANTOS

# Estudo e Determinação de Constante de Acoplamento $^3J_{CH}$

Aluna: Eduarda Sangiogo Gil

Orientador: Prof. Dr. Francisco Paulo dos Santos

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Os trabalhos pioneiros de Karplus, mostrando a dependência angular da constante de acoplamento  $^3J_{XY}$  em um fragmento X-C-C-Y, foram utilizados para a determinação da estereoquímica relativa em compostos orgânicos de origem sintética e naturais. Posteriormente, a equação original de Karplus, foi modificada para levar em conta uma série de outros efeitos tais como, outros tipos de núcleos presentes no fragmento X-C-C-Y, efeito de eletronegatividade e efeitos dos ângulos de ligação.<sup>1,2</sup>

Hansen discutiu em 1981 uma série de tendências que podem influenciar o acoplamento  $^3J_{CH}$ .<sup>3</sup> Recentemente Peralta e Contreras publicaram uma revisão discutindo os efeitos conformacionais e a dependência angular do acoplamento  $^3J_{CH}$  em uma série de diferentes compostos orgânicos.<sup>4</sup> Mais recentemente, dos Santos e colaboradores, discutiram que interações hiperconjugativas entre orbitais ligantes e antiligantes são relevantes para o acoplamento  $^3J_{CH}$  em derivados da norcânfora.<sup>5</sup> Observou-se que um grupo carbonila presente no fragmento H-C(O)-C-C afeta de forma definitiva os acoplamentos  $^3J_{CH}$  nestes compostos estudados, que passam a não mais seguir a relação de Karplus.<sup>5</sup>

Portanto, neste trabalho foi avaliada uma série de diferentes compostos derivados do norbornano para observar a influência das interações hiperconjugativas na constante de acoplamento  $^3J_{CH}$ . Para atingir tal objetivo, as constantes de acoplamento foram obtidas teoricamente e experimentalmente. As interações hiperconjugativas foram calculadas através dos cálculos de NBO (Natural Bond Orbital). Os resultados demonstraram um efeito determinante nas interações hiperconjugativas. Observou-se que as interações hiperconjugativas que retiram carga do caminho do acoplamento  $^3J_{CH}$  levam a sua diminuição do mesmo, independente do ângulo diédrico entre os núcleos que se acoplam. Concluímos que os acoplamentos estudados não seguem a relação de Karplus e são influenciados apenas pelas interações hiperconjugativas envolvendo os orbitais ligantes e antiligantes.

## Referências:

- 1 – Eliel, E. L. 100+ years of conformational analysis. In *Conformational Behavior, and Six-Membered Rings: Analysis, Dynamics, and Stereoelectronic Effects*; Juaristi, E. Ed.; VCH Publisher: New York, 1995.
- 2 – Esteban, A. L.; Galache, N.P.; Mora, F.; Diez, E.; Casanueva, E. J.; San Fabián, J.; Barone, V.; Peralta, J. E.; Contreras, R. H.; *J. Phys. Chem. A* **2001**, *105*, 5298-5303.
- 3 – Hansen, P.E.; *Prog NMR Spectrosc* **1981**, *14*, 175.
- 4 - Contreras, R.H.; Peralta, J.E.; *Prog NMR Spectrosc* **2000**, *37*, 321.
- 5 - dos Santos, F.P.; Tormena, C.F.; Contreras, R. H.; Rittner, R.; Magalhaes. A.; *Magn. Reson. Chem.* **2008**, *46*, 107.