

Estudo experimental e teórico das interações intermoleculares envolvidas na conformação de algumas α -metilsulfonil- α -dietoxifosforilacetofenonas-*para*-substituídas.

Adriana Karla Cardoso Amorim Reis (PQ)^{1*}, Paulo Roberto Olivato² e Cláudio Francisco Tormena (PQ)³

¹Campus de Diadema, UNIFESP, Rua Prof. Artur Ridel, 275 - Bairro Eldorado CEP 09972-270 Diadema - SP – Brasil.

² Conformational Analysis and Electronic Interactions Laboratory, Instituto de Química, USP, Caixa Postal 26077, 05513-970 São Paulo, SP, Brazil;

³ Physical Organic Chemistry Laboratory, Instituto de Química, UNICAMP, Caixa Postal 6154, 13.084-971 Campinas, S.P., Brasil;

adrianakarla.amorim@gmail.com

Palavras Chave: acetofenonas-*para*-substituídas, cálculo teórico, espectroscopia no IV

Introdução

O presente trabalho mostra o estudo conformacional de acetofenonas α -tio- α -fosforil substituídas que têm sido alvo de nossos estudos.¹ As α -metilsulfonil, α -dietoxifosforil-acetofenonas-*para*-substituídas (Y=MeO, H, F, Cl, Br e NO₂) foram estudadas através da espectroscopia no IV e de cálculos teóricos, objetivando verificar as possíveis conformações estáveis dessa série de compostos.

Alguns desses compostos foram estudados e apresentaram atividade anti-colinesterásica.²

Resultados e Discussão

Os dados IV da banda da carbonila dos derivados da série das α -metilsulfonil- α -dietoxifosforil-acetofenonas-*para*-substituídas apoiados pelo cálculo *ab initio* em nível HF/6-31G(d,p) da α -metilsulfonil, α -dietoxifosforilacetofenona (composto de referência), indicaram a existência em solução de uma única conformação estável para toda a série (Figura 1).

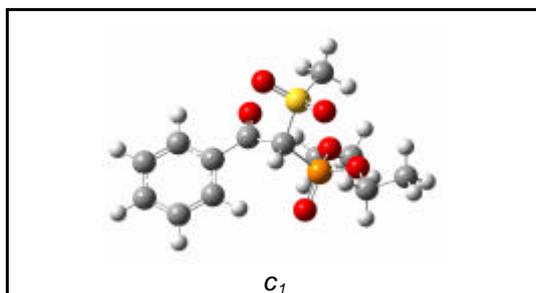
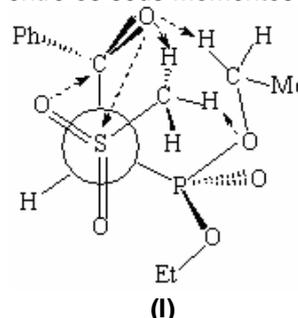


Figura 1. Conformação otimizada em nível HF/6-31G(d,p) da α -metiltio, α -dietoxifosforil-acetofenona, utilizada como composto de referência da série.

Essa conformação apresenta os grupos (MeSO₂) e [P(O)(OEt)₂] na geometria *sin-clinal* em relação à carbonila.

As interações Coulombicas e orbitales que estabilizam a única conformação existente são as interações eletrônicas O^{δ-}_{(SO₂)...C^{δ+}_(CO) e O^{δ-}_(CO)...S^{δ+}_(SO₂) e as ligações de hidrogênio H^{δ+}_(CH₃SO₂)...O^{δ-}_(PO) e H^{δ+}_(POCH₂)...O^{δ-}_(CO) (I). Os dados da estrutura de difração de Raio-X da α -metilsulfonil, α -dietoxifosforil-*para*-bromoacetofenona no estado sólido estão de pleno acordo com a única conformação estável presente no estado gasoso, a qual estabiliza o cristal através de um forte acoplamento entre os seus momentos dipolares.}



Conclusões

As α -metilsulfonil- α -dietoxifosforilacetofenonas-*para*-substituídas, apresentam uma única conformação estável e a mesma é, principalmente, estabilizada pelas interações cruzadas entre interações eletrônicas O^{δ-}_(SO₂)...C^{δ+}_(CO) e O^{δ-}_(CO)...S^{δ+}_(SO₂). Essa mesma conformação é encontrada no estado sólido.

Agradecimentos

À Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP).

¹Reis, A. K. C. A.; Olivato, P.R.; Zukerman-Schpector, J.; Tormaen, C. F.; Rittner, R.; Domingues, N. L. C. and Dal Colle, M.; *J. Mol. Struct.*, **2006**, 798, 57.

²Sega, E. M.; Reis, A. K. C. A.; Rittner, R.; Olivato, P. R.; Rodrigues, A.; Carvalho, J. E.; Castilho, R. F. and Höehr, N. F.; *Clinica Chimica Acta* (submetido).