

Síntese e Estudo Conformacional de algumas *N*-metil- δ -valerolactamas- α -feniltio e *N*-metil- δ -valerolactamas- α -fenilsulfonil 4'-substituídas

Jean Miguel M. Santos¹ (IC)*, Carlos Rogério Cerqueira Júnior¹ (PG), Paulo Roberto Olivato¹ (PQ)*

¹Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil, *e-mail: jeanmms@usp.br ou proliat@iq.usp.br

Palavras Chave: análise conformacional, lactama, infravermelho.

Introdução

A análise conformacional da 4'-metoxi-3-feniltio-*N*-metil 2-piperidona (I) e sua respectiva sulfona, 4'-metoxi-3-fenilsulfonil-*N*-metil 2-piperidona (II) (Fig. 1), por meio da espectroscopia no infravermelho tem como objetivo determinar as conformações mais estáveis destes compostos em meios de diferentes polaridades.

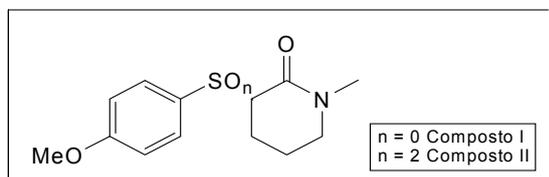


Figura 1. Compostos estudados.

O estudo em questão foi realizado com o intuito de verificar como a variação do substituinte *para* e o grau de oxidação do átomo de enxofre afetam o equilíbrio conformacional.

Resultados e Discussão

A síntese das *N*-metil- δ -valerolactamas- α -substituídas é esquematizada na Fig. 2.

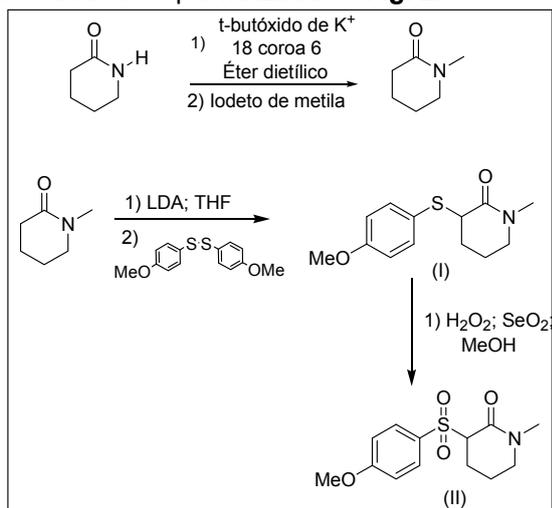


Figura 2: Rota sintética dos compostos I e II.

Os compostos inéditos I e II foram purificados por coluna cromatográfica e caracterizados por RMN de ¹H, ¹³C e análise elementar.

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de ¹H e ¹³C permitiu-nos verificar que os espectros das

substâncias obtidas correspondem às formas estruturais das moléculas esperadas; a pureza das amostras foi atestada por análise elementar, que apresentaram um valor teórico muito próximo do valor experimental (valor compreendido no intervalo de 3 : 1000).

Após a purificação e caracterização dos compostos foram adquiridos os espectros de infravermelho em solventes de constantes dielétrica crescente (*n*-C₆H₁₄, CCl₄, CHCl₃, CH₂Cl₂, CH₃CN) dos compostos I e II, dos quais se analisou a banda de estiramento da carbonila na região de 1650 - 1750 cm⁻¹.

A análise das bandas de infravermelho dos dois compostos indica que o perfil das bandas de ν CO em CCl₄ na transição fundamental e 1^o harmônico são bastante semelhantes, indicando a existência de equilíbrio conformacional nos compostos estudados.

Analisando os espectros de infravermelho do composto I é possível verificar que este quando em *n*-hexano, apresenta dois componentes, sendo que o componente de maior frequência apresenta maior intensidade relativa. Isso indica que neste meio há dois confôrmeros distintos, sendo o mais estável aquele que corresponde à banda de ν CO de maior intensidade relativa¹. Nos demais solventes é observada apenas uma banda.

No composto II, em CCl₄ e CH₃CN há apenas um componente de ν CO, enquanto nos solventes de polaridade intermediária (CHCl₃ e CH₂Cl₂) há mais de um componente.

Conclusões

As análises realizadas demonstram que os compostos estudados apresentam equilíbrio conformacional, desta forma é possível prosseguir com a síntese dos próximos compostos das séries das 3-feniltio-*N*-metil-2-piperidinonas e 3-fenilsulfonil-*N*-metil-2-piperidinonas 4'-substituídas, permitindo então entender o comportamento conformacional geral destes.

Agradecimentos

CNPq, FAPESP, LCCA-USP

¹ Bellamy, L.J., *Advances in Infrared Group Frequencies*, Chapman and Hall, Londres, 1975, pg: 154.