

## Estudo de análise conformacional e cálculos teóricos de derivados da 3-fenilsulfanilciclohexanona *para*-substituídas.

Elias B. Oliveira Filho (IC)<sup>1</sup>, Beatriz A. L. da Silva (IC)<sup>1</sup>, Elvis L. F. Assunção (PG)<sup>1</sup>, Nelson L. C. Domingues (PQ)<sup>\*1</sup>

LMH - Laboratório de Materiais Híbridos - Universidade Federal da Grande Dourados, Rodovia Dourados-Itahúm km 12 P.O.Box 533, CEP 79804-970 – Dourados-MS-Brasil. E-mail: [nelsondomingues@ufgd.edu.br](mailto:nelsondomingues@ufgd.edu.br)

Palavras Chave: infravermelho, cálculos teóricos, ciclohexanona

### Introdução

Muito do que se sabe hoje sobre a análise conformacional deriva do estudo de ciclohexanos substituídos e o equilíbrio conformacional desta classe de compostos tem sido extensivamente reavaliado com o uso principalmente de cálculos computacionais. Tais cálculos proporcionam inestimáveis informações sobre os efeitos que governam a preferência conformacional, não apenas desta classe de compostos, mas de tantas outras. Estas informações são obtidas não apenas em função da natureza dos substituintes, mas também do meio na qual a molécula se encontra (vapor, em fase condensada na presença ou de um solvente ou uma biomolécula, etc.) Todavia, o estudo para cicloalcanos monossustituídos em grande parte se restringem a compostos substituídos na posição alfa à carbonila. Tendo em vista esta discrepância, foi realizado o estudo de cálculos teóricos dos derivados sulfanilados da ciclohexanona substituída na posição beta (Figura 1).

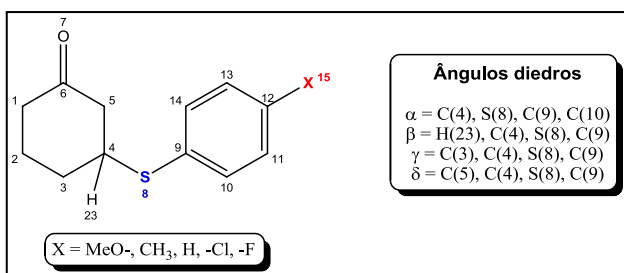


Figura 1. Estrutura dos derivados 3-fenilsulfanilciclohexanonas estudados.

### Resultados e Discussão

Os compostos de interesse foram obtidos através de reações envolvendo catalisadores heterogêneos híbridos fornecendo o composto de interesse em altos rendimentos. Através da análise conformacional via infravermelho utilizando-se solventes de polaridade crescente foi observado que o operador da carbonila tanto em seu estiramento fundamental quanto em seu *overtone* era compostos por duas bandas de frequências distintas e meias larguras equivalentes ( $\Delta\nu \pm 15\text{cm}^{-1}$ ). O componente

de maior frequência diminuía com o aumento da polaridade do solvente enquanto o de menor, por sua vez, aumentava a frequência com o aumento da polaridade do solvente. Através de cálculos teóricos foi possível propor a existência de cinco conformeros dispostos em três equatoriais (Eq1, Eq2 e Eq3) e dois axiais (Ax1 e Ax2). Para todos os solventes nos quais foram realizados os cálculos teóricos foi identificado que o Eq 2 fora o mais estável. Todavia os demais variavam continuamente com a variação dos solventes conforme a Figura 2.

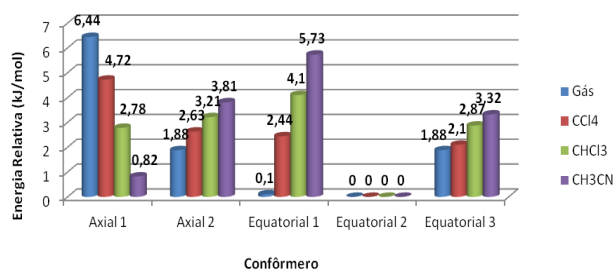


Figura 2. Energia relativa obtida através do HF 6-31G para os conformeros da 3-fenilsulfanilciclohexanona

Através da confrontação de dados de  $\pi_{\text{CO}}$  obtidos via NBO e da literatura foi possível verificar que em solventes de baixa polaridade os conformeros axiais eram responsáveis pela menor frequência do componente da carbonila enquanto que os equatoriais pelo componente de maior frequência. Já em solventes mais polares, decorrente do efeito de solvatação específica de grupos, ocorre um agrupamento entre Eq1 e Ax2 responsáveis pelo componente de maior frequência e os Eq2, Eq3 e Ax1 responsáveis pelo componente de menor frequência.

### Conclusões

O estudo de infravermelho juntamente com os dados de cálculos teóricos possibilitaram a identificação dos conformeros responsáveis pelos componentes da carbonila tanto em sua vibração fundamental quanto em seus respectivos *obvertones*.

### Agradecimentos

À UFGD e LMH

<sup>1</sup> Olivato P. R., et all, *Molecules*, 2013, 18, 7492-7509