

SALÃO DE
INICIAÇÃO CIENTÍFICA
XXIX SIC

UFRGS
PROPESQ



múltipla 
UNIVERSIDADE
inovadora  inspiradora

Evento	Salão UFRGS 2017: SIC - XXIX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2017
Local	Campus do Vale
Título	Estudo Experimental e Teórico do Equilíbrio Ceto-Enólico e Conformacional do 2-Cicloexanocarboxilato de Etila e Derivados
Autor	KAROLINE BELOMO
Orientador	FRANCISCO PAULO DOS SANTOS

Estudo Experimental e Teórico do Equilíbrio Ceto-Enólico e Conformacional do 2-Cicloexanocarboxilato de Etila e Derivados

Estudo Aluna: Karoline Belomo

Orientador: Prof. Dr. Francisco Paulo dos Santos

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Equilíbrios tautoméricos são de fundamental importância em estudos de estrutura molecular, principalmente em química orgânica e bioquímica. É conhecido que tais equilíbrios são importantes tanto na determinação estrutural como na atividade biológica de aminoácidos, açúcares e ácidos nucleicos. [1-3] A química dos compostos 1,3-dicarbonílicos é um tópico de muito interesse dentro da química orgânica, com destaque particular para seu tautomerismo cetoenólico. [4] Existem estudos na literatura mostrando a existência das formas di-ceto e ceto-enólicas. Equilíbrios cetoenólicos têm sido extensivamente estudados através de técnicas espectroscópicas. Dentre tais técnicas podemos destacar a Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN). A RMN é uma importante ferramenta para estudos de equilíbrio cetoenólicos, porque pode fornecer informações da transferência de prótons entre as espécies presentes. Além do mais, a partir da intensidade relativa dos sinais das formas ceto e enólica no espectro de RMN de ^1H é possível observar qual das formas é predominante em uma dada temperatura. Podemos destacar também, que os deslocamentos químicos dos ^1H na forma enólica fornece importantes informações com respeito a formação de ligações de hidrogênio inter e intramolecula.[5]

Portanto, neste trabalho foi estudado o equilíbrio cetoenólico do etil-2-oxicloexano-carboxilato e derivados, através da espectroscopia de RMN e cálculos teóricos. Foi mostrado que as existe um forte efeito do solvente no equilíbrio cetoenólico dos compostos estudados. Através dos cálculos teóricos conseguimos explicar de maneira detalhada os fatores que governam a estabilidade das formas cetos e enólicas dos diferentes compostos nos solventes. Ressaltamos que tais compostos também apresentaram um equilíbrio conformacional na sua forma ceto. Os resultados mostraram que os substituintes podem apresentar diferentes orientações (*axial* ou *equatorial*), quando estudado em diferentes solventes na temperatura de 25 °C.

1. M. Takasuka, T. Saito, H. Nakai, Vib. Spectrosc. 13 (1996) 65.
2. J. Lu, B. Han, H. Yan, J. Supercrit. Fluids 15 (1999) 135.
3. J.L. Jios, H. Duddeck, Magn. Reson. Chem. 38 (2000) 512.
4. J. L. Holmes, F. P. Lossing, J. Am. Chem. Soc. 1982, 104, 2648 –2649.
5. F. Turecheckcek, L. Brabec, J. Korvola, J. Am. Chem. Soc. 1988, 110, 7984 – 7990.