

Química

Estabilidade regio e estereoquímica induzida por efeitos anoméricos e gauche em pirrolidinas difluoradas

Ana Flávia Cândida Silva - 9o módulo de Química, UFLA, bolsista PIBIC/FAPEMIG.

Matheus Puggina de Freitas - Orientador DQI, UFLA - Orientador(a)

Resumo

Este estudo explora os efeitos conformacionais em pirrolidinas difluoradas, com foco nos efeitos anomérico e gauche. A pirrolidina fluorada é de grande interesse biológico, especialmente devido à sua capacidade de modular a estabilidade conformacional, como ocorre na prolina fluorada. A pesquisa envolveu cálculos de química quântica para investigar o equilíbrio conformacional e os efeitos de substituição com flúor em pirrolidinas difluoradas. Foi realizado um estudo de benchmark para comparar diferentes métodos da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) com o método de Nível de Cluster Acoplado com Excitações Simples e Duplas (CCSD). O melhor método identificado foi o B3LYP-D3BJ/6-311++G**, que foi utilizado para avaliar as pirrolidinas 2,3-, 2,4- e 3,4-difluoradas. Os resultados mostram que o efeito anomérico, relacionado à delocalização eletrônica nN \rightarrow σ^*_{C-F} , desempenha um papel crucial na estabilidade conformacional, enquanto o efeito gauche do flúor tem um papel secundário. A análise de Orbitais Moleculares Naturais (NBO) revelou que as interações de hiper correlação contribuem significativamente para a estabilidade de certos isômeros, que foram os mais estáveis devido à separação adequada dos átomos de flúor por um grupo metileno. Conclusão: Os efeitos anomérico e gauche influenciam a estabilidade conformacional, com o efeito anomérico sendo predominante em pirrolidinas difluoradas. Isso é importante para o design de moléculas de alto desempenho com controle conformacional. Palavras-chave: pirrolidina fluorada; estereoquímica; efeito anomérico; efeito gauche

Palavras-Chave: efeito gauche, pirrolidinas difluoradas, análise conformacional.

Instituição de Fomento: Fapemig

Link do pitch: https://youtu.be/24Utu_4UTEI