

01. **Dissertação:** “A Determinação do Padrão de Substituição de Xantonas por Espectrometria no Infravermelho”.

Autor: Jamil Corrêa Mourão

Orientador: Dr. Otto Richard Gottlieb

Data da Defesa: 30/09/1966

Resumo: O objetivo inicial deste trabalho consistia numa tentativa de determinação do padrão de substituição de xantonas hidroxiladas e metoxiladas por espectrometria no infravermelho. Regras comumente encontradas na literatura informa que tanto as frequências de vibração fora do plano de ligações C-H aromáticas, como as frequências de seus sobretons, dependem apenas do número e da posição dos substituintes no núcleo aromático, mas independem de sua natureza química. Diante deste fato pensou-se que a técnica pudesse contribuir ponderavelmente para a solução do problema da distribuição dos grupos no esqueleto xanônico. O estudo da região de $700-900\text{ cm}^{-1}$, que corresponde às frequências fundamentais das vibrações fora do plano das ligações C-H aromáticas, nos revelou que a metilação de grupos hidroxila na posição 1 ou 3 do esqueleto xanônico provoca profundas alterações na feição desta faixa espectral. As alterações que ocorrem são deslocamentos das bandas para frequências menores, frequentemente acompanhadas de desdobramentos de bandas e aumento na intensidade das mesmas. Já a metilação de grupos hidroxila em posições não conjugadas com a carbonila não apresenta alterações significativas nesta região espectral, notando-se apenas ligeiras modificações de intensidade. Por outro lado, acetilação de grupos hidroxila do esqueleto xanônico produz alterações muito pequenas na mesma região espectral ou seja, ocorrem ligeiros deslocamentos de bandas para frequências maiores, acompanhados de diminuição da intensidade. Também a metilação de grupos hidroxila que leva derivados estericamente impedidos não provoca alterações de posição das bandas, mas altera sensivelmente a intensidade das mesmas. Devemos comunicar ainda que, em todos os espectros de acetoxixantonas notamos a presença de uma forte banda "extraordinária" em $880-900\text{ cm}^{-1}$.