

57. **Dissertação:** “Efeito de Átomos de Flúor no Equilíbrio Conformacional de Chalconas”

**Autor(a):** Dari Cesarin Sobrinho

**Orientador(a):** Prof. José Carlos Netto Ferreira

**Data da Defesa:** 21/01/94

**Resumo:** Chalcona (1) e seus derivados fluorados 2-4, bem como os análogos cíclicos 5-10, foram sintetizados via reação de condensação, em meio básico, entre as cetonas e os aldeídos correspondentes e, caracterizados por espectrometria de massas, ressonância magnética nuclear de próton e de carbono 13 e por espectroscopia no infra-vermelho. Técnicas modernas de RMN permitiram concluir que 1-4 apresentam configuração trans, enquanto que o equilíbrio conformacional está preferencialmente deslocado no sentido da conformação s-cis, o qual varia como uma função da substituição por átomos de flúor no anel A ou B. Estudos por infra-vermelho indicaram que a percentagem da formação s-cis em 2-4 é de 57,4 +/- 1,4; 88,1 +/- 0,4 e 66,4 +/- 0,7%, respectivamente, com base no valor calculado por RMN 1H (83%) descrito na literatura para a chalcona (1). Cálculos teóricos (MMX) foram utilizados para justificar as variações para os deslocamentos químicos apresentados por 1-10 como consequência da influência anisotrópica do grupo carbonila nestes compostos.