

132 ESTUDO COMPARATIVO DE SILILCETENAS ACETAIS ENTRE OS MÉTODOS MM2 E AM1. Eduardo Tavares*, Marco Aurélio de Araujo. (Lab. Materiais Poliméricos Multifásicos, Instituto de Química, Centro Nacional de Supercomputação, UFRGS).

O estudo de moléculas através de simulação computacional traz valiosas informações para a pesquisa racionalizando o trabalho no laboratório. Contudo devido a existência de um grande número de métodos para simulação torna-se necessário encontrar-se um método que gere resultados mais precisos. No presente trabalho, é feita a comparação entre dois métodos que estão disponíveis na UFRGS; o método MM2 (Molecular Mechanics 2) através do programa PC Model Versão 4 e o método AM1 (Austin Model 1) através do programa UniChem Versão 1.1. Para tal estudo utilizou-se as sililcetenas acetais que são importantes iniciadores de Polimerização por Transferência de Grupo (GTP), que são objetos de estudo em nosso laboratório. A sililcetena acetal possui a fórmula estrutural básica mostrada na figura 1; onde R pode ser: metila, etila, terbutila, ciclohexila, fenila, 2-metilfenila, 2,6-dimetilfenila ou endo-bomila (figura 2). Os dados fornecidos por ambos os programas mostram variações na estrutura das sililcetenas, evidenciando diferenças significativas entre os métodos. (CNPq, CAPES, FAPERGS, PROPESP)

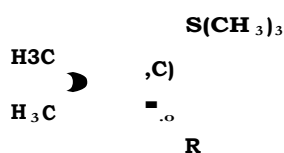


Figura 1

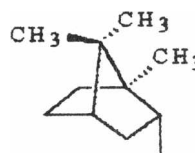


Figura 2