

1 4 4 ANÁLISE CONFORMACIONAL DE SILILCETENAS ACETAIS ATRAVÉS DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL. Eduardo Tavares*, Renato A. Konra!b, Marco Aurélio de Araujo, Jairton Duoont.. Paolo Roberto Livotto. (Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, UFRGS).

A análise conformacional fornece valiosas informações sobre a energia potencial, reatividade e estabilidade das moléculas. Com o auxílio de um microcomputador pode-se obter estruturas minimizadas em energia e com isso realizar-se análise de conformações. A partir de uma estrutura inicial o microcomputador faz um intenso tratamento matemático após o qual é gerado um relatório contendo os dados sobre comprimentos, ângulos e energias das ligações bem como uma estrutura mjnimiuda. Este trabalho é realizado com o objetivo de analisar-se a viabilidade de síntese de diversas silicetenas. *AB* silicetenas são importantes iniciadores de polimerização por transferência de grupo e neste caso obtidas a partir de isobutiratos contendo diferentes grupamentos. A fórmula básica de uma sililcetena é $(CH_3)_2C=C(OSiMe_3)OR$ onde R pode ser: metila, etila, terbutila, ciclohexila, fenila, 2-metilfenila, 2,6-dimetilfenila ou endo-bomila. Os dados fornecidos pelo microcomputador permitem analisar as estruturas das diversas sililcetenas no espaço em função do aumento do volume do grupo R substituinte. (CNPq, CAPES, FAPERGS, PROPESP)