

004

ANÁLISE DAS ENERGIAS DOS ESTADOS DE TRANSIÇÃO NA ALQUILAÇÃO DE ENAMINAS. *Leandro G. da Silveira* (IC)^a, *Paulo A. Netz* (PQ)^b, *Eduardo R. de Oliveira* (PQ)^{a*}. a) DQO-IQ-UFRGS b) FQ-ULBRA

Uma metodologia de construção de ligação C-C de forma estereosseletiva muito utilizada em síntese sesquiterpenos¹ com atividade biológica, é a reação de alquilação desracemizante com enaminas quirais. Na reação entre as enaminas derivadas da (*R*)-dihidrocarvona¹ com a (*S*) e (*R*)- α -metilbenzilamina obteve-se um caso de dupla indução assimétrica, observando-se um caso *matched* com o isômero *RS* e *mismatched* com o *RR*.. O objetivo deste trabalho é o estudo, via cálculos teóricos, do estado de transição desta reação de alquilação, realizando-se uma análise detalhada dos estados de transição dos ataques eletrofílicos aos diferentes isômeros das enaminas, em distintas orientações. O conhecimento destes é necessário para estimarmos quais os produtos cineticamente mais favorecidos. Para isso, a primeira etapa foi o aprendizado dos *softwares* SPARTAN (utilizando métodos semi-empíricos – AM1) e JAGUAR (utilizando métodos *ab initio* pseudoespectral – base 6-31G*) visando a reprodução de dados de Houk², onde foi estudada a reação da vinilamina com etileno (reação concertada com transferência parcial de hidrogênio no estado de transição). Com base nisto, partiu-se para a modelagem dos estados de transição da reação de alquilação acima citada, utilizando num primeiro momento, estruturas moleculares mais simples. (1) Tenius, B.S.M.; de Oliveira, E.R.; Ferraz, H.M.C.. *Tetrahedron Asymmetry* **1993**, 4, 633. (2) Lucero, M.J.; Houk, K.N.. *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, 119,826. (PROPESQ-UFRGS).