

240

**ESTUDO DO MECANISMO DE ROTAÇÃO DA LIGAÇÃO N-CO DE N-ARILCARBAMATOS POR MODELAGEM MOLECULAR.** Fábio dos Santos Grasel, Luiz Antonio Mazzini Fontoura (orient.) (ULBRA).

Amidas e derivados apresentam, em geral, duas geometrias de equilíbrio, resultado da barreira energética envolvida no processo rotacional da ligação entre o nitrogênio e a carbonila. O mecanismo da rotação desta ligação é influenciado por fatores eletrônicos e estéreos, sendo estes últimos, normalmente, os mais importantes. Neste aspecto, amidas e carbamatos derivados da anilina são substratos particularmente interessantes, uma vez que efeitos eletrônicos e estéreos podem ser avaliados através de substituintes apropriados no anel ou no nitrogênio. Neste trabalho, o mecanismo rotacional da ligação entre o nitrogênio e a carbonila de *N*-fenilcarbamatos e seus derivados *p*-substituídos (R= MeO, Me, Cl e NO<sub>2</sub>) foi estudado por modelagem molecular através do semi-empírico AM1 e do *ab initio* HF/6-31G\*. A análise conformacional forneceu duas geometrias de equilíbrio (*E* e *Z*) e duas conformações de máxima energia, tomadas como aproximações dos estados de transição do processo de rotação interna. As barreiras rotacionais foram estimadas através das diferenças de energia entre as geometrias de equilíbrio e os estados de transição. O cálculo *ab initio* estima as barreiras na faixa entre 13 e 17 kcal.mol<sup>-1</sup>. Resultados semi-empíricos forneceram barreiras de, aproximadamente, 40% dos valores estimados pelo método *ab initio*.