

**1 1 1 ANÁLISE ESTEREOQUÍMICA AUXILIADA POR
COMPUTADOR Konrath, R. A. e Dupont, J.
Instituto de Química - UFRGS**

A análise conformacional de moléculas pode fornecer preciosas informações a respeito de sua energia potencial, reatividade e estabilidade. Com o auxílio de um microcomputador pode-se obter estruturas moleculares minimizadas em energia e realizar análise de conformações e estabilidade de uma molécula e compará-la a seus isômeros, derivados ou precursores assim como o efeito de substituintes (eletrônico, estérico e de posição). Os resultados são obtidos a partir de uma estrutura inicial (in put) que após sofrer um tratamento computacional intenso gera dados (out put) sobre as energias de ligação, angular, torcional e de Van der Waals bem como uma estrutura minimizada. Estes dados permitem assim relacionar a estabilidade e reatividade relativa destas moléculas com suas estereoestruturas. Estudos de mecânica molecular utilizando-se os programas D'IMM (Desk Top Molecular Modeling) e MM2 (Molecular Modeling, 2) realizados com o IPDI (5-isocianato-1-isocianato-1,3,3-trimetil ciclohexano) indicam que a reatividade dos grupos isocianatos (primário e secundário dependem da configuração e assim como de suas conformações. Estes resultados teóricos foram corroborados experimentalmente. (CNPq e FAPERGS).

