

342

**ESTUDO COMPUTACIONAL DO PROCESSO ROTACIONAL DA LIGAÇÃO N-CO EM AMIDAS E CARBAMATOS DERIVADOS DA ANILINA.** *Tiago Charão de Oliveira, Fábio dos Santos Grasel, Italo José da Cruz Rigotti, Luiz Antonio Mazzini Fontoura (orient.)* (Química, ULBRA).

Ácidos carboxílicos e derivados apresentam uma barreira energética envolvida na rotação da ligação entre o heteroátomo e a carbonila, o que resulta no aparecimento de duas conformações planares de equilíbrio. A maior estabilidade desses confôrmeros tem sido atribuída à ressonância do par isolado do nitrogênio com a carbonila. A conversão entre essas duas geometrias de equilíbrio pode ocorrer por dois caminhos passando por diferentes estados de transição. Neste trabalho, foram estimadas por modelagem molecular as barreiras rotacionais do N-fenil-N-metilcarbamato de metila e da N-acetil-N-metilnilina e alguns derivados p-substituídos (Me, OMe, NO<sub>2</sub>, Br). Foram realizadas otimizações de geometria para as conformações de cada composto por cálculo semi-empírico AM1 (PcSpartan Plus 1.5) para ângulos de diedro C<sub>ipso</sub>-N-C-O restritos de 0° a 360° com incrementos de 10°. As barreiras foram estimada na faixa de 5 a 7 kcal.mol<sup>-1</sup>. Grupos doadores de elétrons ligados diretamente ao anel provocaram um aumento da barreira rotacional. Grupos retiradores causaram um efeito inverso. Além disso, os N-amilcarbamatos de metila apresentaram uma barreira energética inferior às N-acilanilinas, fenômeno provavelmente ocasionado pelo efeito eletrônico do grupo alcóxi ligado diretamente à carbonila.