214

UTILIZAÇÃO DE MÉTODOS DE MODELAGEM MOLECULAR NO ESTUDO DA DUPLA INDUÇÃO ASSIMÉTRICA NA REAÇÃO DE ALQUILAÇÃO DESRACEMIZANTE VIA IMINAS QUIRAIS. *Doriane Sacheto*[a], *Paulo A. Netz*[b] *e Eduardo R. de Oliveira*[a] ([a] Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, [b] Departamento de Química, Universidade Luterana do Brasil).

A reação de alquilação desracemizante via iminas quirais tem sido utilizada em nosso grupo de pesquisa como método de preparação de sesquiterpenos opticamente ativos com interesse biológico[1]. Em 1993[2], descrevemos a influência de um carbono quiral pré-existente no substrato nos resultados de indução assimétrica na reação entre a metilvinilcetona e as enaminas diastereoisoméricas obtidas por condensação entre a (*R*)-dihidrocarvona (*R*)- e (*S*)-metilbenzilamina. Observa-se que na reação da enamina (*R*,*S*) o aduto de Michael é obtido com um e.d.≥ 95%(caso *matched*), Já com a enamina (*R*,*R*), observa-se uma sensível redução da diastereosseletividade (e.d.= 58%, caso *mismatched*). A explicação deste resultado sem precedentes deve provavelmente ter origem em problemas conformacionais devido a presença do substituinte isopropenila. Neste trabalho nos propomos a estudar este problema utilizando cálculos de mecânica molecular com vistas a obter subsídios para a explicação da diastereosseletividade desta reação. A modelagem computacional utilizando métodos de mecânica molecular representa uma ferramenta no estudo teórico, que embora não tão precisa quanto cálculos quânticos (*ab-initio*, semi-empírico ou DFT), permite o estudo de energias relativas de isômeros, bem como o mapeamento de barreiras torsionais e um estudo conformacional. Preliminarmente estamos estudando as energias conformacionais relativas das enaminas da dihidrocarvona, para desta forma estudar as posições de equilíbrio entre tais isômeros para a seguir podermos discutir as diferentes possibilidades de ataque do eletrófilo. Refs. 1) C. Viegas Jr., E.R.de Oliveira, B.S.M. Tenius, *Anais do V Encontro da SBQ Sul*, Porto Alegre, 1997; 2) B.S.M. Tenius, E.R. de Oliveira e H.M.C. Ferraz, *Tetrahedron:Asymmetry* **1993**, *4*, 633. (FAPERGS)