

34. **Dissertação:** “Identificação Sistemática de Triterpenos Pentacíclicos Via Computador”.

**Autor:** Cláudia Maria Branco de Freitas Maia

**Orientador:** Prof. Raimundo Braz Filho e Dr. Vicente Emerenciano

**Data da Defesa:** 16/09/1988

**Resumo:** Este trabalho descreve a criação e a implantação em microcomputador de uma metodologia para a identificação de esqueletos de triterpenos pentacíclicos. A metodologia tem como base um procedimento chamado desfuncionalização no qual o espectro de RMN de  $^{13}\text{C}$  de uma substância é analisado e os sinais interpretados como oriundos de carbonos funcionalizados são selecionados. O programa considera então os carbonos responsáveis por estes sinais como se fossem seus correspondentes desfuncionalizados, por exemplo,  $\text{R}^2\text{CO}$  como  $\text{R}_2\text{CH}_2$ ,  $\text{RCO}_2\text{H}$  como  $\text{RCH}_3$ , etc. É feita uma nova contagem do número de metilas, metilenas, metinas e carbonos quaternários e o número obtido é fornecido para outra subrotina denominada TERPTIPO que sugere um esqueleto provável para a substância. Além dessas funções heurísticas utilizadas, o programa possui também outro módulo de confrontação espectral que permite listar as semelhanças de um espectro de uma amostra com um banco de dados constituído por cerca de 200 espectros de RMN de  $^{13}\text{C}$  de triterpenos pentacíclicos.