



E440

**ESTUDO TEÓRICO DO MECANISMO DA REAÇÃO DE REDUÇÃO DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS UTILIZANDO O BOROHIDRETO DE SÓDIO E UM ELETRÓFILO**

José Carlos Barreto de Lima (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O borohidreto de sódio reduz o ácido carboxílico na presença de um eletrófilo. O objetivo deste trabalho é propor um mecanismo do processo em fase gasosa da reação de redução do ácido carboxílico por borohidreto de sódio na presença de um eletrófilo ( $H_2SO_4$ ). Os dados de entrada obtidos do Molden foram utilizados para o cálculo teórico dos valores de energia livre, da frequência vibracional, do comprimento da ligação e das densidades de carga das espécies utilizando o programa Gaussian/98. O método de cálculo utilizado foi o modelo G3. Os resultados mostraram que os valores de densidade de carga foram coerentes com os ataques da primeira reação entre o borohidreto e o ácido carboxílico em acordo com o mecanismo sugerido. O produto intermediário para este ataque apresentou uma estabilização de  $22,78 \text{ kcal.mol}^{-1}$  em relação aos reagentes iniciais. Outro fato observado foi a diminuição, no produto formado, do comprimento de ligação entre o oxigênio ligado ao boro e ao carbono carbonílico, e também o aumento no comprimento de ligação entre o carbono carbonílico e seu oxigênio, o que mostra que a estrutura formada possui ligações intermediárias entre ligações duplas e simples, resultando em uma estrutura de ressonância. Dessa forma, este estudo preliminar mostrou que o mecanismo proposto da primeira etapa está em acordo com os cálculos teóricos. Estudo complementar em andamento.

Redução de ácidos carboxílicos - Borohidreto de sódio - Cálculo teórico