



E0512

**ESTUDO DO MECANISMO DE ABERTURA DO ÓXIDO DE ALFA-PINENO**

Thais Mendonca Barbosa (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Claudio Francisco Tormena (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Epóxidos são importantes intermediários em síntese orgânica, o que despertou o interesse no estudo da abertura do óxido de  $\alpha$ -pineno com ácido clorídrico (HCl), com o intuito de determinar a estabilidade dos possíveis carbocátions envolvidos, dos estados de transição e dos produtos formados, bem como a determinação da estereoquímica relativa dos produtos, através da espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear e cálculos teóricos da estrutura eletrônica. Os cálculos teóricos foram efetuados em nível DFT/B3LYP e MP2 empregando o conjunto de bases aug-cc-pVDZ disponíveis no pacote GAUSSIAN-03, para a determinação das energias e geometrias tanto dos carbocátions como dos produtos formados. A análise conjunta de todos esses dados permitiu avaliar qual o correto mecanismo de abertura do óxido de  $\alpha$ -pineno em meio ácido, que é aquele no qual ocorre a formação do carbocátion terciário o qual isomeriza para dois carbocátions secundários, através da expansão do anel de quatro membros.

Abertura de epóxido - Mecanismo de reação - Estabilidade de carbocátion