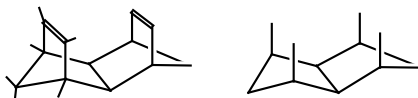


087**VARIAÇÃO PERCENTUAL DE PRODUTOS NA REAÇÃO DE ACETILAÇÃO DO ISODRIN EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA E TEMPO DE REAÇÃO***Valentim U. Costa (orientador), João Alifantes (IC) e Alexandre A. M. Lapis (IC) (Instituto de Química- Departamento de Química Orgânica-UFRGS)*

Estruturas policíclicas tem sido utilizadas como ligantes para a preparação de catalizadores do tipo de Wilkinson. O isodrin (I) é utilizado como matéria prima na obtenção de policíclicos assimétricos, sendo uma das rotas possíveis a acetilação do Isodrin (I). Na literatura está descrito que esta reação forma apenas os produtos (II) e (III). Entretanto, verificou-se que variando a temperatura e o tempo de reação, obtém-se, além daqueles citados, os produtos (IV) e (V).



A detecção desses últimos produtos somente foi possível utilizando-se RMN. Os resultados obtidos com a variação daqueles parâmetros encontram-se na tabela abaixo.

| produtos condições | II | III | IV | V |
|--------------------|--------|-----|--------|--------|
| 125°C/60 min. | 50% | 50% | -o- | -o- |
| 115°C/20 min. | 35% | 60% | traços | traços |
| 105°C/2 min. | traços | 33% | 33% | 33% |

A determinação percentuais dos produtos formados foram realizados por RMN-1H e por determinação ponderal das frações obtidas por separação em coluna cromatográfica em sílica gel (60), eluindo em éter de petróleo e éter etílico. Através de cálculos de mecânica molecular foram determinadas as entalpias de formação dos produtos e fez-se a correlação entre esses dados com os observados experimentalmente. (CNPq)