

Síntese de hidroximetilfurfural e caracterização de subprodutos da reação via RMN-H

5-Hidroximetilfurfural (HMF) pode ser obtido a partir da desidratação de açúcares utilizando líquidos iônicos como meio reacional. Este HMF, obtido de fonte renovável, pode ser utilizado como material de partida para a produção de poliésteres, poliamidas e poliuretano, além disso, oxidando o HMF podemos obter o ácido 2,5-furano-dicarboxílico (FDCA) que pode ser utilizado em substituição do ácido tereftálico na produção de polímeros como o Poli(tereftalato de etileno) (PET) e o Poli(tereftalato de butileno) (PBT). A substituição do ácido tereftálico, obtido a partir do petróleo, por um ácido obtido de fonte renovável é de grande interesse, tanto do ponto de vista ambiental quanto do ponto de vista mais amplo, da sustentabilidade.

Na primeira etapa do projeto foram realizadas sínteses do HMF, nas quais ocorre uma reação de desidratação onde o açúcar é solubilizado no líquido iônico juntamente com um catalisador apropriado, sob aquecimento, eliminando três mols de água. O líquido iônico utilizado na obtenção do HMF é o cloreto de 1-dodecil-3-metilimidazol. As sínteses são realizadas sob aquecimento controlado por um termopar, agitação constante e atmosfera inerte.

Estas reações foram analisadas em um cromatógrafo líquido (HPLC) e é possível notar que apesar do alto consumo do açúcar a seletividade em HMF não é completa, sendo possível verificar-se a presença de subprodutos. A técnica de HPLC não permite a identificação destes compostos, de modo que a segunda etapa do projeto visa identificar os principais subprodutos presentes nas reações via análises de RMN ¹H. Para isto, foram analisados os espectros de RMN ¹H da frutose e do HMF e algumas reações foram escolhidas para que fosse efetuado o acompanhamento do desaparecimento do reagente e o surgimento do 5-hidroximetilfurfural diretamente por esta técnica. Todas as sínteses selecionadas utilizaram o mesmo catalisador (ácido clorídrico) e foram solubilizadas no líquido iônico cloreto de 1-dodecil-3-metilimidazol, mantendo como variáveis as proporções entre o açúcar e o solvente. Até o momento ainda estão sendo testadas proporções e condições que permitam a identificação e caracterização dos subprodutos.