



Evento	Salão UFRGS 2013: SIC - XXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2013
Local	Porto Alegre - RS
Título	Isomerização seletiva do estragol
Autor	ALESSANDRA PAZINI
Orientador	JAIRTON DUPONT

O *trans*-anetol é um composto natural que tem sido largamente utilizado na indústria de alimentos e bebidas e como intermediário valioso na síntese de produtos farmacêuticos e de perfumaria. Esse produto tem sido tradicionalmente extraído dos óleos de anis e erva-doce, embora com proporções variáveis de seu isômero *cis* como impureza. No entanto, devido a crescente demanda industrial tornou-se necessário o desenvolvimento de rotas sintéticas alternativas e mais eficientes para a obtenção seletiva do produto *trans*, uma vez que o isômero *cis* apresenta alta toxicidade e propriedades organolépticas desagradáveis. Várias metodologias têm sido descritas para a obtenção deste composto, entretanto essas rotas não têm se mostrado economicamente viáveis. Neste trabalho, obteve-se o *trans*-anetol através da isomerização seletiva do estragol, utilizando-se compostos organometálicos em sistemas bifásicos com líquidos iônicos. Inicialmente, foram realizados testes catalíticos variando-se o complexo organometálico empregado. Utilizou-se para os testes 2 mmol de substrato, temperatura reacional de 80 °C, tempo de 1 h e 0,5 mL de solvente (tolueno ou etanol). Todas as reações foram realizadas em triplicata e os produtos analisados por cromatografia gasosa e ressonância magnética nuclear. Foram testados os precursores PdCl₂(NCPh)₂, RhCl(PPh₃)₃ e RuHClCO(PPh₃)₃. Dentre estes, o RuHClCO(PPh₃)₃ foi o que apresentou os melhores resultados em termos de conversão (100% em 1 h) e seletividade (95% no produto *trans*-anetol). A seguir, realizaram-se testes variando-se a quantidade de precursor catalítico empregado (0,5 mol%, 0,75 mol% e 1 mol%) e o melhor resultado foi obtido com 0,75 mol% de RuHClCO(PPh₃)₃. Variou-se também a temperatura reacional, sendo que a 35 °C obteve-se uma conversão de 96% em 7 h de reação e a 80 °C obteve-se uma conversão de 100% em apenas 1 h. Sendo assim, manteve-se como melhor temperatura a temperatura de 80 °C. Por fim, realizaram-se testes utilizando-se 0,75 mol% do precursor RuHClCO(PPh₃)₃, temperatura de 80 °C, 0,5 mL de tolueno como solvente e foram retiradas alíquotas de 5 em 5 minutos durante a reação com a finalidade de se observar o perfil de consumo do substrato e de formação dos produtos. Dessa forma, observou-se que em apenas 5 minutos de reação houve a total conversão do substrato em produtos e a seletividade no produto de interesse foi de 98%. Com as condições reacionais otimizadas, foram realizados testes utilizando-se o líquido iônico BMI·NTf₂ como solvente com o intuito de permitir a simples separação dos produtos do meio reacional. Assim, obteve-se uma conversão de 100% em 5 minutos e a seletividade no produto *trans* manteve-se elevada (98%). A próxima etapa desse projeto consiste na obtenção de um sistema que permita a reutilização do precursor catalítico. Isso será realizado através da adição de fosfinas ionofílicas ao sistema, o que aumenta a afinidade entre complexo catalítico e o líquido iônico, imobilizando o precursor nessa fase, e permitindo a sua reutilização.