



MODIFICAÇÃO QUÍMICA DE TERPENÓIDES POR CATÁLISE ÁCIDA E PRESSÃO

Guilherme Ballardin (BIC-UCS), Sidneia Danetti (co-orientadora), Sidnei Moura e Silva (Orientador(a))

Este estudo tem como objetivo, efetuar a modificação química de terpenóides lineares por catálise ácida utilizando reator de pressão para produção de moléculas com aplicação industrial. A adição de pressão à um sistema reacional, seja por adição de fluido pressurizado (reator à um volume constante), ou por compressão mecânica (reator com volume variável), implica na adição de energia ao processo reacional e levará à formação de produtos termodinamicamente desfavorecidos. A utilização de pressão também pode ser utilizado para descolar a constante de equilíbrio de reações químicas clássicas com a variação da energia de Gibbs negativa. Estas reações apresentam uma poderosa aceleração induzida por pressão, frequentemente utilizada para obtenção de cicloalcanos com aplicação industrial. O projeto tem por metodologia a utilização de terpenos comerciais (citral, citronelal e mirceno); catalisadores ácidos de Lewis (AlCl_3 , ZnCl_2 , ZnBr_2 , CuCl_2 , CuCl , PdCl_2 , NiCl_2 , MnCl_2 e Cr_2O_3); a padronização dos parâmetros do reator, tais como temperatura, pressão, gás, velocidade de agitação, tempo de reação e concentração de reagentes; efetuar a purificação das amostras utilizando sistema de destilação por arraste vapor e por fim a identificação e quantificação dos compostos por Cromatografia a Gás com Espectrometria de Massas (GC-MS). Como metodologia de síntese, o planejamento inicial segue os seguintes parâmetros: intervalos de temperaturas de trabalho: 30-100°C; intervalos de pressão de trabalho: 1-120 bar; intervalos de tempo de reação: 30-180 min; volume de solvente: 50 mL; quantidade de precursor: 2,5 mmol; quantidade de catalisador: 10 mol% (0,25 mmol); o reator será pressurizado com gás inerte N_2 . Por fim, para a identificação dos produtos de síntese, os produtos voláteis serão separados do catalisador por destilação úmida (arraste a vapor), secas com agente dessecante Na_2SO_4 anidro e analisados por cromatografia a gás acoplada ao detector de massas, serão monitorados o desaparecimento do pico do reagente precursor e o aparecimento de picos de produtos. Os produtos de reação serão identificados por comparação dos espectros de massas coletados com espectros padrões da base de dados do fabricante, comparação com padrões autênticos ou por análise dos índices de retenção de Kovats.

Palavras-chave: Catálise, Pressão, Terpenoides

Apoio: UCS, FAPERGS