



Evento	Salão UFRGS 2014: SIC - XXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2014
Local	Porto Alegre
Título	Síntese e Hidroformilação de novos Polióis através da funcionalização de Epóxidos com o Glicerol
Autor	DOUGLAS TAKESHI KUAMOTO
Orientador	RICARDO GOMES DA ROSA

O glicerol é um subproduto de grande peso na indústria química. Resultado da transesterificação de óleos vegetais para a formação do biodiesel, este representa cerca de 10% de massa dos triglicerídeos transesterificados. Desde então procuramos métodos alternativos de seu reaproveitamento.

Nossa proposta se resume na utilização do glicerol como nucleófilo em reações com o óxido de limoneno (S (-) mistura *cis* (54%) / *trans* (47%)) para gerar um novo éter trihidroxilado e, posteriormente, hidroformilado para a formação de novos aldeídos; hidroaminometilação para a formação de aminas. Nosso grupo de pesquisa vem trabalhando neste projeto há alguns anos e, portanto, já se tem conhecimento de aspectos da reatividade da aminólise, sendo possível controlar as condições experimentais para que se obtenha uma grande diastereosseletividade em favor do isômero *trans* do epóxido; sabe-se que o produto (triol) reage exclusivamente através das hidroxilas terminais (CG-MS, ¹H RMN e ¹³C RMN). Também temos conhecimento prévio das reações de hidroformilação (2h a 100 °C, CO/H₂=1, 40 bar) e hidroaminometilação (5h de reação na presença de uma amina e sob pressão de H₂, exclusivamente). Os métodos utilizados para identificar as novas aminas obtidas foram: CG, CG-MS e UV.

O trabalho desenvolvido no período desse estágio apoiado pela bolsa FAPERGS-PROBIC, fixou-se na otimização no isolamento dos produtos da alcoólise (diol e triol) e no desenvolvimento de métodos cromatográficos para o isolamento dos aldeídos e aminas gerados pela hidroformilação e hidroaminometilação dos polóis, respectivamente.

A glicerólise foi realizada utilizando quantidades equimoleculares de glicerol e óxido de limoneno S (-) mistura *cis* (54%) / *trans* (47%), a reação foi realizada a 100 °C e agitação constante por 22 horas (tempo estipulado visando a seletividade da reação com relação ao isômero *trans*). Os produtos obtidos foram o diol (44,1%) (resultado do ataque nucleofílico da água presente no glicerol e necessária como promotora da reação) e o triol (55,9%), determinados por CG. Através de um balanço de massas, constatou-se um rendimento de 83% em relação ao consumo do isômero *trans* do epóxido. Posteriormente os produtos foram separados por cromatografia por coluna utilizando sílica como fase estacionária e uma mistura de 4% (em volume) de metanol e 96% de acetato de etila como eluente. Bons resultados de separação do diol e do triol foram observados até o presente momento (obtivemos triol com 80% de pureza contaminado com 20% de diol). Outros testes visando a maior purificação do triol estão em andamento. Com esse produto puro, será possível determinar a configuração exata dos carbonos do anel que sofreram a glicerólise e esclarecer seu mecanismo.

Buscamos agora desenvolver um método que separe com eficiência as aminas e os aldeídos (produtos da hidroaminometilação e hidroformilação do triol) que, até então, não foi encontrado.