

Aplicação dos conceitos de Química Verde em Síntese Orgânica

Lucas de Oliveira Vicente Mario^{1*}; Adriana da Veiga Torres²; Juliana Baptista Simões³

¹Discente no Instituto Federal Fluminense Campus Itaperuna; ²Discente do Programa de Pós-Graduação em Química da UFOP; ³Docente no Instituto Federal Fluminense Campus Itaperuna

*lucas.mario@gsuite.iff.edu.br

Resumo

A capacidade de sintetizar moléculas de forma eficiente e sustentável é crucial para a química, que precisa atender a requisitos, como: seletividade; eficiência; utilização de sistemas atóxicos; minimização da geração de resíduos e subprodutos. Nesse sentido, o uso de reagentes renováveis e catalisadores eficientes torna-se um destaque. O objetivo foi desenvolver uma metodologia de obtenção de quinolinas alinhadas à Química Verde, utilizando o cinamaldeído extraído do óleo essencial da casca da canela como matéria-prima; catalisadores eficientes e de menor toxicidade. Quinolinas são moléculas utilizadas em fármacos, corantes e em materiais. A reação estudada foi entre a anilina e o cinamaldeído, na proporção de 1:1, utilizando como solvente a acetonitrila ou o metanol e um catalisador ácido de Brønsted ou Lewis (10 mol%). Foram estudados seis catalisadores: FeCl₃; SnCl₂; TiO₂; HgO; ácido trifluoroacético (C₂HF₃O₂); e ácido ascórbico (C₆H₈O₆) e o tempo de cada reação foi monitorado de 2 à 24 horas. Frações das reações foram coletadas e analisadas por cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas. Os catalisadores FeCl₃ e SnCl₂ não formaram produtos. O uso do TiO₂ após 4h de reação apresentou uma conversão de 62% para o sinal em 14,5 min. possivelmente o produto desejado a 1,4-fenilquinolina, além da presença de sinais correspondentes a intermediários, essa reação foi monitorada até 24h, entretanto não houve aumento da conversão. O catalisador HgO apresentou uma conversão de 82% com 8h de reação, entretanto a toxicidade do HgO é alta. O uso do C₆H₈O₆ converteu os materiais de partida em um intermediário (12,5 min.) e o produto (14,5 min.; conversão = 40%) após 4h. Estendendo o tempo até 8h a conversão para o sinal 14,5 min. subiu para 80%. O C₂HF₃O₂ com 4h de reação forneceu a conversão de 42% (14,5 min.). A proporção de cinamaldeído:anilina foi avaliada, para os catalisadores TiO₂ e C₆H₈O₆, empregando as proporções 1:1, 2:1 e 3:2, porém não houve aumento da conversão. O sinal em 14,5 min. foi isolado, por cromatografia em coluna, e obtido o espectro de RMN de ¹H indicando a presença do esqueleto quinolínico, porém novas análises serão necessárias para caracterização estrutural. Avaliando a eficiência e a toxicidades dos catalisadores definiu-se o C₆H₈O₆ como catalisador mais promissor, utilizando portanto o C₆H₈O₆ como catalisador, acetonitrila como solvente e o tempo de 8h, o escopo dessa condição reacional foi avaliado utilizando a 4-bromoanilina como componente amino.

Palavras-Chave: Óleo essencial. Síntese orgânica. Química verde.
Instituição de fomento: CNPq e IFFluminense