Determinação dos produtos de oxidação da reação de ozonólise em fase gasosa do geraniol

Joyce Mara dos S. Barbosa (PG)[1*], André Paulo B. de Carvalho (IC)[1] e Jailson B. de Andrade (PQ)[1].

[1]*Instituto de Química, Universidade Federal da Bahia, Campus de Ondina, CEP 40170-290, Salvador-BA.*
joyara@pop.com.br

Palavras Chave: *compostos orgânicos voláteis, ozonólise de monoterpenóides, geraniol*

Introdução

A emissão de compostos orgânicos voláteis (COV) pela vegetação é a maior fonte de espécies orgânicas reativas para a atmosfera. Especialmente nos últimos anos, as reações atmosféricas dos COV de origem biogênica tem recebido bastante atenção por sua contribuição na formação de compostos carbonílicos, radicais livres, ácidos carboxílicos e aerossóis secundários, provenientes principalmente da oxidação de monoterpenóides[1].

O presente trabalho tem como objetivo a determinação dos produtos de oxidação provenientes da ozonólise em fase gasosa do geraniol em câmaras de teflon, sob condições atmosféricas, sem a interferência de radicais OH·.

O geraniol é um monoterpenóide que pode ser encontrado em óleos essenciais de plantas típicas do Brasil e por isso pode estar presente na atmosfera proveniente de emissões por estas plantas[2].

Resultados e Discussão

Na reação geraniol/O_3 formam-se dois ozonídeos primários os quais se decompõem em quatro birradicais de Criegee e quatro compostos carbonílicos[2].

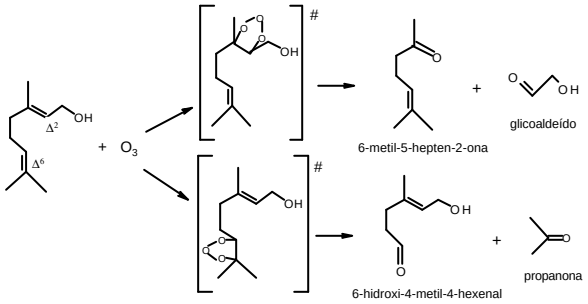

Figura 1: Mecanismo proposto para a ozonólise do geraniol.

Os produtos da reação geraniol/O_3 em fase gasosa foram identificados como sendo 6-metil-5-hepten-2ona (6M5H2ONA), glicoaldeído, 6-hidroxi-4-metil-4-hexenal, propanona, formaldeído e acetaldeído.

Os carbonílicos formaldeído, acetaldeído e propanona foram amostrados em cartuchos Sep-Pak C_{18} impregnados com 2,4-dinitrofenil-hidrazina (0,4%) e analisados por CLAE/UV (λ=365nm). Já os carbonílicos 6M5H2ONA e glicoaldeído foram amostrados em cartucho Sep-Pak sílica e analisados por CG/EM usando coluna PE-FFAP (fase polar).

As quantidades molares do 6M5H2ONA e da propanona foram, respectivamente, 7-11% e 15%. Já o formaldeído e acetaldeído formados por reações de estabilização dos birradicais de Criegee apresentaram, respectivamente, quantidades molares variando de 8-12% e 11-14%, Tabela 1.

Tabela 1: Experimentos geraniol + O_3.

Amostra	HCOH	CH_2COH	$(CH_3)_2CO$	6M5H2ONA
	Rend	Rend	Rend	Rend
Média*	12.961	11.17	15.533	6.635
Desv Pad	1.677	1.71	1.752	0.244
Média*	8.018	12.02	15.102	7.882
Desv Pad	1.279	1.28	1.777	1.385
Média*	10.698	14.373	15.024	11.340
Desv Pad	0.383	3.389	0.370	0.921

*n=3

O glicoaldeído formado na reação pelo ataque a ligação dupla Δ^2 foi encontrado nas amostras obtidas nos experimentos, mas não foi quantificado. Já o 6-hidroxi-4-metil-4-hexenal não foi encontrado em nenhum dos experimentos.

O baixo rendimento encontrado para o 6M5H2ONA e a não detecção do 6-hidroxi-4-metil-4-hexenal, pode significar que a propanona origina-se da decomposição do 6M5H2ONA ou ainda, a metodologia empregada não foi adequada para sua determinação.

Conclusões

A determinação do 6M5H2ONA e a identificação do glicoaldeído nas amostras revela a preferência de ataque do O_3 a ligação dupla Δ^2 no geraniol e reforça o mecanismo proposto para a ozonólise do geraniol.

Agradecimentos

CNPq, FAPESB, FINEP, PRONEX, ANEEL e CAPES

[1] Atkinson, J. & Arey, J. *Atmos. Environ.* **2003**, *37 supl.*, S197.
[2] Nunes, F.M.N.; Veloso, M.C.C.; Pereira, P.A.P e de Andrade, J.B. *Atmos. Environ.* **2005**, *39*, 7715.