

# Síntese do éter isobornílico do guaiacol catalisada por heteropoliácido

Kelly A. da Silva Rocha (PQ)<sup>a,\*</sup>, Enio José Leão Lana (PQ)<sup>b</sup>, Ivan V. Kozhevnikov (PQ)<sup>c</sup>, Elena V. Gusevskaya (PQ)<sup>d</sup>.

<sup>a</sup> Departamento de Química, Universidade Federal de Ouro Preto, 35400-000, Ouro Preto, MG, Brasil

<sup>b</sup> Fundação Centro Tecnológico de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, 31170-000, Belo Horizonte, MG, Brasil

<sup>c</sup> Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, 31270-901, Belo Horizonte, MG, Brasil

<sup>d</sup> Leverhulme Centre for Innovative Catalysis, Department of Chemistry, University of Liverpool, Liverpool L69 7ZD

\*Autora a quem dirigir a correspondência: kellyrocha@iceb.ufop.br

Palavras Chave: catálise, heteropoliácido, éter

## Introdução

Os heteropoliácidos (HPAs), em especial, os da série de Keggin tem atraído grande interesse como catalisadores ácidos, em processos limpos e eficientes para a síntese de produtos de química fina. HPAs podem ser empregados em várias classes de reações e vêm se destacando devido suas propriedades e vantagens frente aos catalisadores ácidos convencionais [1-2]. Neste trabalho, foi utilizado o heteropoliácido  $H_3PW_{12}O_{40}$  (PW) na obtenção do éter a partir do canfeno e guaiacol.

O canfeno é um monoterpene encontrado na maioria dos óleos essenciais, sendo também obtido via isomerização de pinenos catalisada por ácidos [3]. É utilizado na síntese de substâncias oxigenadas de grande interesse comercial, empregadas na formulação de sabões, cosméticos, perfumes e fármacos, por exemplo, o borneol, o isoborneol e seus acetatos [3,4], e na obtenção de ésteres e éteres utilizados como fragrâncias, através de reações com ácidos carboxílicos e álcoois [4].

Neste trabalho, observou-se que o canfeno e o guaiacol na presença do PW levam a formação de um éter identificado e caracterizado como um composto inédito, o éter isobornílico do guaiacol (**1**), juntamente com o isoborneol (**2**) e o éter di-isobornílico (**3**).

## Resultados e Discussão

As transformações do canfeno e guaiacol na presença do PW solúvel foram estudadas em soluções de nitrobenzeno (sistema homogêneo), e os resultados obtidos apresentados na Tabela 1.

A conversão final do canfeno atingiu valores máximos próximos a 50-60% independente da temperatura do meio de reação e o composto **1**, resultante do acoplamento entre o canfeno e o guaiacol, foi obtido com seletividade próxima a 45% nas condições otimizadas (exp 4). É importante mencionar, que somente outro produto principal é formado neste sistema: o éter di-isobornílico. De modo que a seletividade conjunta para **1+3**,

facilmente separáveis, atinge valores próximos a 90%, o que contribui para a importância sintética do processo, uma vez que, ambos éteres obtidos possuem potencial aplicação na indústria da química fina.

**Tabela 1.** Resultados das transformações do canfeno e guaiacol catalisadas por  $6,5 \times 10^{-3}$  % mol de  $H_3PW_{12}O_{40}$  (PW) em nitrobenzeno

Exp	Canfeno/ guaiacol / mol/L	Temperatura / °C	Tempo <sup>a</sup> / min	Conversão <sup>b</sup> / %	Seletividade / %			
					1	2	3	Outros <sup>c</sup>
1	0,4/0,4	25	60	36	31	20	49	0
			120	46	32	6	62	0
2	0,4/0,4	40	10	35	36	7	57	0
			120	50	21	5	42	32
3	0,4/0,4	60	20	43	11	6	12	71
			60	57	6	4	5	85
4	0,8/0,8	25	15	44	54	1	39	6
			30	53	47	2	40	11
5	0,4/0,8	25	30	20	40	30	30	-
			180	60	41	3	32	8

<sup>a</sup> Tempo necessário para atingir a máxima conversão,

<sup>b</sup> Os cálculos de conversão foram baseados no canfeno,

<sup>c</sup> Principalmente produtos de oligomerização.

## Conclusões

Desenvolveu-se um processo eficiente de síntese do éter isobornílico do guaiacol a partir do canfeno e guaiacol em fase líquida em condições ambiente, utilizando-se como catalisador o heteropoliácido dissolvido  $H_3PW_{12}O_{40}$ .

## Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq e a FAPEMIG pelo suporte financeiro para a realização desse trabalho.

<sup>1</sup>M.N. Timofeeva; *Appl. Catal. A*, **2003**, 256, 19.

<sup>2</sup>I.V. Kozhevnikov, *Catalysts for Fine Chemicals. Catalysis by Polyoxometalates*, vol.2, Wiley, Chichester, **2002**.

<sup>3</sup>C. Sell in: C. Sell (Ed.), *The Chemistry of Fragrances: from Perfumer to Consumer*, second ed., RSC Publishing, Dorset, UK, vol. 2, **2006**.

<sup>4</sup>Il'ina, I. V., Volcho, K. P., Salakhutdinov, N. F., *Russian Journal of Organic Chemistry*, **2008**, 44,1.