

ESTUDO TEÓRICO DA REAÇÃO DE HIDROFORMILAÇÃO UTILIZANDO A MOLÉCULA DE (-)-ISOPULEGOL PARTE (II).

Yago Francisco Lopes¹, Tarcísio Souza Carvalho²

Grupo de Química Teórica e Estrutural de Anápolis, Ciências Exatas e Tecnológicas.

Universidade Estadual de Goiás, CP 459, 75001-970 Anápolis, GO Brasil.

Abstract: A reação de hidroformilação é amplamente utilizada em vários processos de sínteses de alcoois e aldeídos.¹ Aspectos estéricos e eletrônicos da reação de hidroformilação do (-)-isopulegol catalisada por complexo de ródio (I) determinam sua diastereosseletividade.² O controle dessa seletividade foi estudado usando diferentes grupos protetores: benzoila e Acetila.³ A otimização dos sistemas, bem como os estados de transições foram caracterizados no nível DFT/B3LYP usando o conjunto de funções de base 6-31G* para os átomos de C, H, O e P, e para o Rh foi usado o pseudopotencial LANL2DZ.^{4,5} Todo o procedimento computacional foi realizado no Laboratório de Química Teórica e Estrutural de Anápolis utilizando-se dos *softwares* HyperChem® e Gaussian®. Os resultados obtidos permitiram descrever a etapa 3 que é determinante da estereoquímica da reação, bem como julgar as possíveis estruturas do catalisador, e o desenvolvimento da reação frente aos diferentes grupos protetores.

Key-words: hidroformilação, (-)-isopulegol, complexo de ródio (I), seletividade.

Support: Universidade Estadual de Goiás – Campus de Ciências Exatas e Tecnológicas

References:

- [1] BHATIA, S. P. *et al.* Fragrance material review on isopulegol. (2008). v. 46.
- [2] SHAHARUN, M. S.; MUKHTAR, H.; DUTTA, B. K. Selectivity of Rhodium-catalyzed Hydroformylation of 1-Octene in a Thermomorphic Solvent System. **Journal of Applied Sciences**, 1 jul. (2011). v. 11, n. 7, p. 1157–1163.
- [3] BRAGA, A. L. *et al.* Catálise assimétrica no Brasil: Desenvolvimento e potencialidades para o avanço da indústria química Brasileira. **Química Nova**, (2013). v. 36, n. 10, p. 1591–1599.
- [4] 46GANKIN, V. Y.; GUREVICK, G. S. Chemical Technology of Oxosynthesis. (1970). v. 62.
- [5] CRAMER, C. J. Essentials of Computational Chemistry. Wiley, New York. (2002).



Simpósio Brasileiro de Química Teórica 2017

12 a 17/Nov, 2017, Águas de Lindóia/SP, Brasil