

## CONDENSAÇÃO DE KNOEVENAGEL DE ALDEÍDOS AROMÁTICOS COM O ÁCIDO DE MELDRUM EM ÁGUA: UMA AULA EXPERIMENTAL DE QUÍMICA ORGÂNICA VERDE

Silvio Cunha\* e Lourenço Luis Botelho de Santana

Instituto de Química, Universidade Federal da Bahia, Campus de Ondina, 40170-290 Salvador - BA / Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia - INCT em Energia e Ambiente, Universidade Federal da Bahia, Campus de Ondina, 40170-290 Salvador - BA, Brasil

## Procedimento para construção da Tabela 1

Foi realizada pesquisa na *web of science* em Março de 2011 com a palavra-chave *green chemistry* e refinada com os filtros indicados abaixo.

Topic = (green chemistry)

Refined by: Countries/Territories = (BRAZIL) AND Subject Areas = (CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY OR CHEMISTRY, ORGANIC OR CHEMISTRY, ANALYTICAL OR CHEMISTRY, PHYSICAL OR CHEMISTRY, APPLIED OR CHEMISTRY, MEDICINAL OR CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR) AND Subject Areas = (CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY).

## Procedimento para determinação dos tempos de retenção e análise da mistura de padrões

Para a determinação dos tempos de retenção na CG, foram analisadas soluções individuais dos aldeídos **2a** e **2b** e dos produtos **3a** e **3b** solubilizadas em clorofórmio. As condições de análise estão descritas na Parte Experimental do artigo. Para a determinação do fator de resposta relativo de cada componente **2a** e **2b**, **3a** e **3b**, foi preparada uma solução padrão 0,1 M em cada um dos componentes, solubilizados em clorofórmio e analisadas via CG, de acordo com as condições acima descritas para a determinação dos tempos de retenção.

Tabela 1S. Áreas relativas para a mistura padrão (0,1 M) dos aldeídos

Aldeído	Área no cromatograma		
	1	2	3
4-Metóxi-benzaldeído <b>2b</b>	93283	97700	87772
4-Nitro-benzaldeído <b>2a</b>	68422	76380	67774
Relação entre as áreas	1,363	1,279	1,295

Média da relação entre as áreas relativas (A):  $A_{2b} = 1,3A_{2a}$

Tabela 2S. Áreas relativas para a mistura padrão (0,1 M) dos arilidenos

Arilideno	Área no cromatograma		
	1	2	3
Arilideno do 4-metóxi-benzaldeído <b>3b</b>	97730	112102	95499
Arilideno do 4-nitro-benzaldeído <b>3a</b>	25092	37460	26399
Relação entre as áreas	3,895	2,990	3,618

Média da relação entre as áreas relativas (A):  $A_{3b} = 3,5A_{3a}$

Tabela 3S. Áreas relativas da reação de competição entre os aldeídos **2a**, **2b** e o ácido de Meldrum

Componente/Dados	Área no cromatograma		
	1	2	3
Arilideno do 4-metóxi-benzaldeído <b>3b</b>	18335	17938	16744
Arilideno do 4-nitro-benzaldeído <b>3a</b>	21720	17471	25514
Área de <b>3a</b> corrigida: $3,5A_{3a}$	76020	61148	89299
Relação entre as áreas: $3,5A_{3a}/A_{3b}$	4,146	3,409	5,333

Média da relação entre as áreas relativas: 4,3

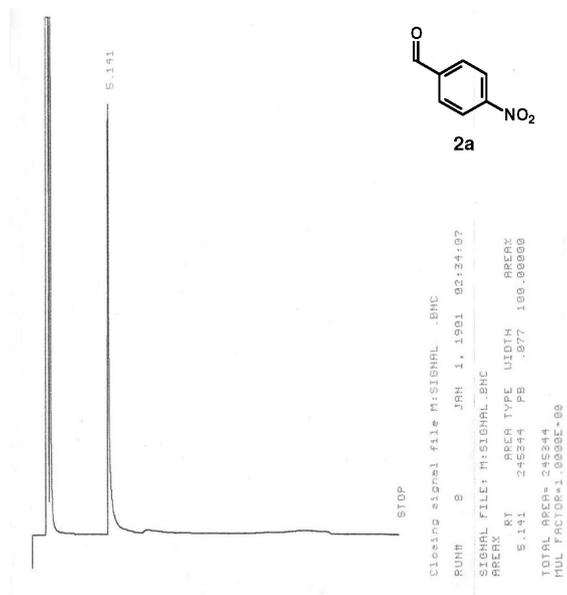


Figura 1S. Cromatograma do 4-nitro-benzaldeído 2a

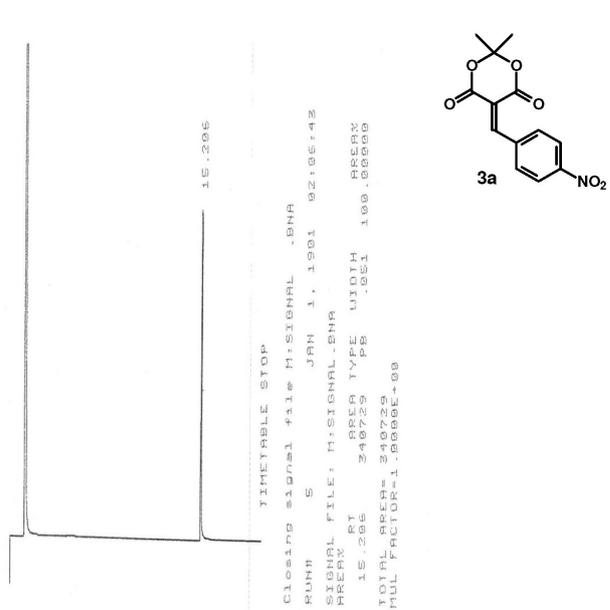


Figura 3S. Cromatograma do 2,2-dimetil-5-(4-nitro-benzilideno)-1,3-dioxano-4,6-diona

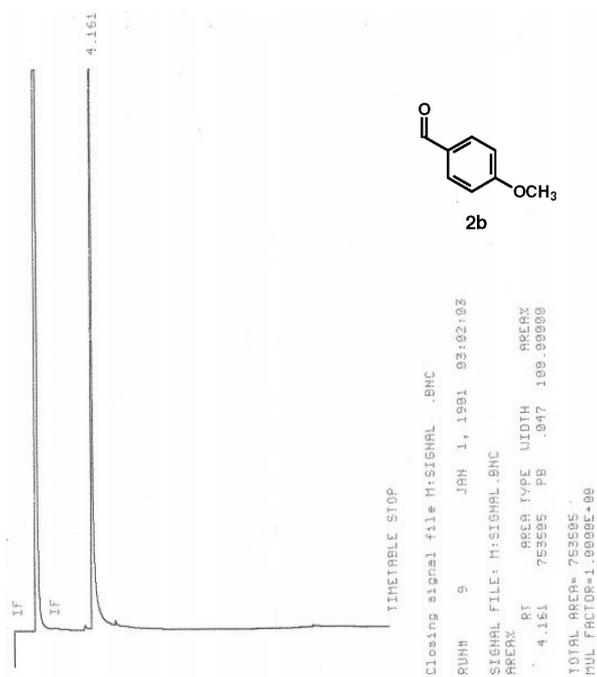


Figura 2S. Cromatograma do 4-metóxi-benzaldeído 2b

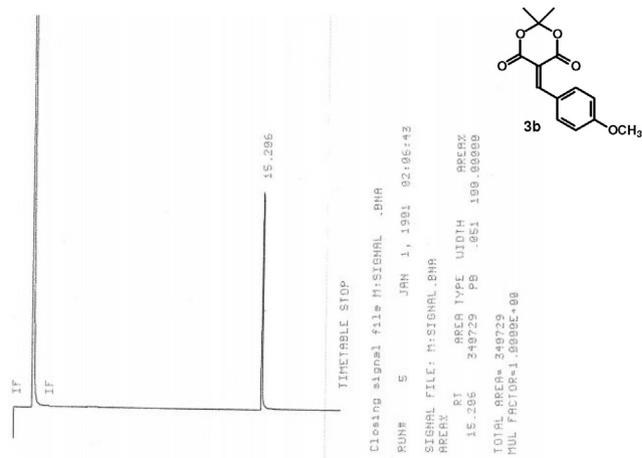


Figura 4S. Cromatograma do 2,2-dimetil-5-(4-Metóxi-benzilideno)-1,3-dioxano-4,6-diona

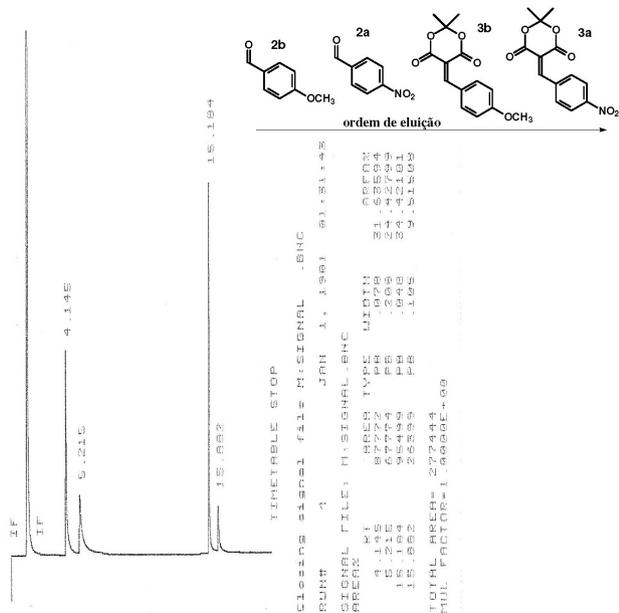


Figura 5S. Cromatograma 1 da mistura de padrões

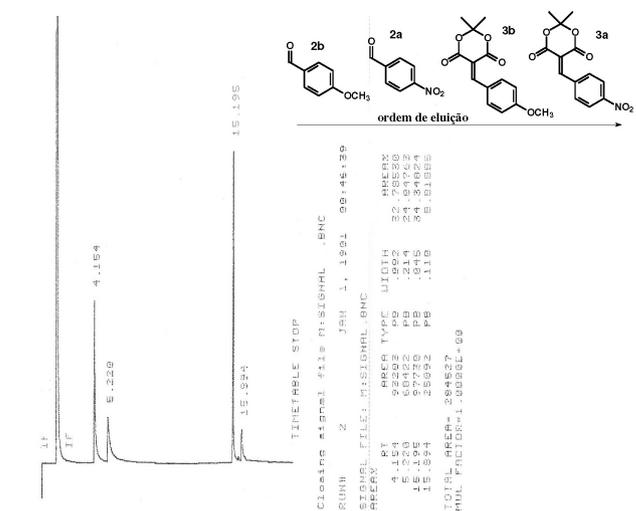


Figura 7S. Cromatograma 33 da mistura de padrões

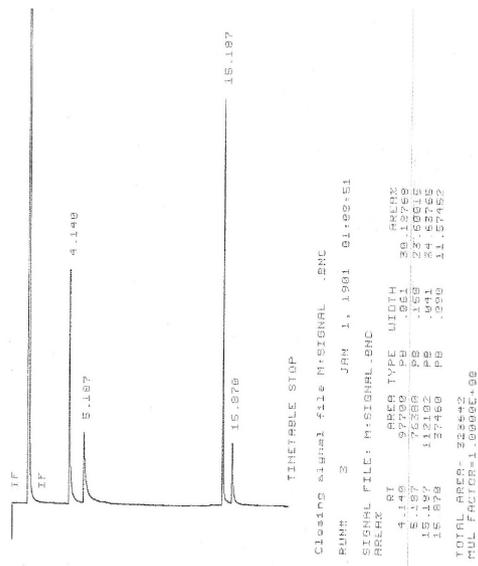


Figura 6S. Cromatograma 2 da mistura de padrões

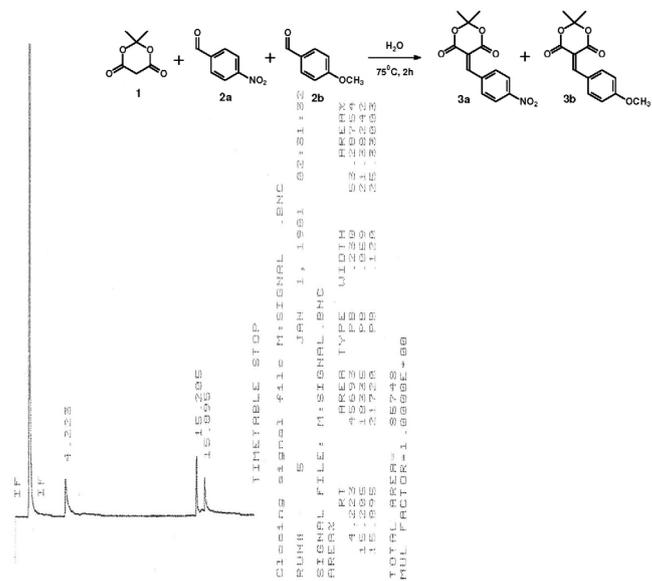


Figura 8S. Cromatograma 1 da mistura reacional

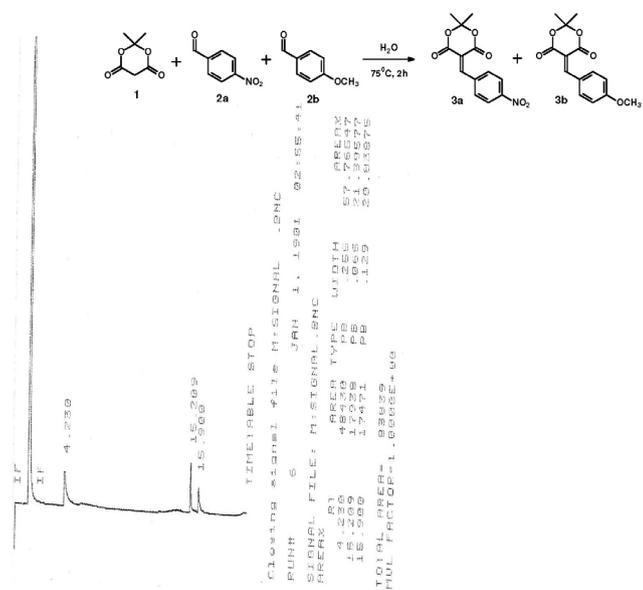


Figura 9S. Cromatograma 2 da mistura reacional

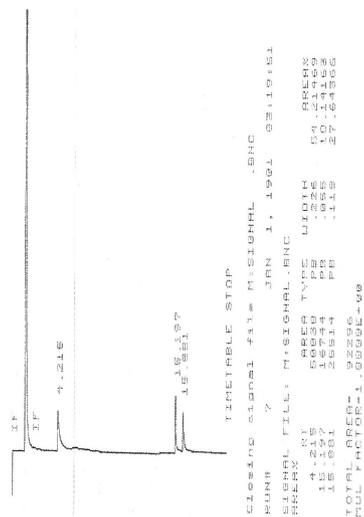


Figura 10S. Cromatograma 3 da mistura reacional