



Síntese de (*Z*)-isodilapiol e (*E*)-isodilapiol para determinação de seus índices de retenção e identificação em amostras de óleo essencial de *Piper aduncum*

Paola E. Gama¹, Humberto R. Bizzo^{1,*}, Ary M. Silveira², Yasmim S. Barros³

¹Embrapa Agroindústria de Alimentos - Av. das Américas, 29501 Rio de Janeiro, Brasil

²Instituto Federal de Ciência e Tecnologia, Campus Nilópolis, Rio de Janeiro, Brasil

³Universidade Federal do Rio de Janeiro - Rio de Janeiro, Brasil

*humberto.bizzo@embrapa.br

Palavras-chave: isodilapiol, dilapiol, *Piper aduncum*, Piperaceae.

O isodilapiol é um isômero do dilapiol, substância majoritária presente em óleo essencial de *Piper aduncum* L. (Piperaceae). Ambos apresentam um grande potencial como inseticidas, em função do grupo metilenodioxifenil em sua estrutura (1,2). O isodilapiol não é disponível comercialmente, mas pode ser obtido sinteticamente por meio de uma reação de isomerização do dilapiol em meio etanólico fortemente alcalino. O produto é uma mistura dos isômeros *Z* e *E*, com predominância deste último, com base em dados de ressonância magnética nuclear (3). Em geral, isômeros apresentam espectros de massas muito semelhantes e para a sua identificação, na análise de óleos essenciais, é feita pela comparação dos índices de retenção lineares (IRL) calculados com dados da literatura (4). A falta de valores de referência para comparação leva, frequentemente, a erros na identificação de constituintes de óleos essenciais. Identificações erradas publicadas e citadas repetidamente, propagam o erro na determinação. O objetivo deste trabalho foi a síntese dos derivados de dois isômeros do isodilapiol e a determinação dos seus índices de retenção para identificação em amostras de óleo essencial de *P. aduncum*. A reação de isomerização foi realizada a partir de dilapiol previamente isolado em solução de KOH 17 % em etanol sob agitação e refluxo por 20 h (3). O produto final contendo os dois isômeros foi purificado por cromatografia em coluna utilizando-se hexano e hexano:acetato de etila como eluentes. As determinações dos índices de retenção e das proporções de cada isômero foram realizadas em sistema CG-EM Agilent 5975C, com coluna capilar HP-5MS (30 m × 0,25 mm × 0,25 µm) e com fluxo de Hélio de 1,0 mL/min. A programação de temperatura foi de 60 a 260°C (3°C/min) e o detector de massas foi operado em modo de ionização eletrônica a 70 eV. Os isômeros foram identificados pelos espectros de massas e pela proporção de área absoluta obtidas, na razão de 1:9. Os valores dos índices de retenção determinados foram de 1658 para o (*Z*)-isodilapiol e 1713 para o (*E*)-isodilapiol. A diferença entre os IRL encontrados foi suficiente para permitir a identificação inequívoca dos dois isômeros.

1. Maia et al., Flavour and Fragrance Journal, 1998, 13, 269-272.
2. Pinto et al., Journal of Mosquito Research, 2012, 2, 1-7.
3. Pinto, A.C.S., Desenvolvimento de Substâncias Semissintéticas e Bioativas a partir de 4-Nerolidilcatechol e Dilapiol. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Amazonas, 2008.
4. Bizzo et al., Química Nova, 2020, 43, 98-105.

Agradecimentos: Sra. Marcellly C. S. Santos; CNPq (bolsas PIBIC e PQ).