

**UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ**

**RENAN FERNANDO RIGUEIRA**

**SÍNTESE DE DERIVADOS DA VANILINA E APLICAÇÃO DO COMPOSTO  
(*E*)-4-(4-HIDROXI-3-METOXIFENIL)BUT-3-EN-2-ONA EM DISPOSITIVO  
ORGÂNICO FOTOSENSÍVEL**

**CAMPO MOURÃO**

**2023**

**RENAN FERNANDO RIGUEIRA**

**SÍNTESE DE DERIVADOS DA VANILINA E APLICAÇÃO DO COMPOSTO  
(*E*)-4-(4-HIDROXI-3-METOXIFENIL)BUT-3-EN-2-ONA EM DISPOSITIVO  
ORGÂNICO FOTOSENSÍVEL**

**SYNTHESIS OF VANILLIN DERIVATIVES AND APPLICATION OF THE  
COMPOUND (*E*)-4-(4-HYDROXY-3-METHOXYPHENYL)BUT-3-EN-2-ONE IN A  
ORGANIC PHOTSENSITIVE DEVICE**

Trabalho de conclusão de curso de graduação apresentado como requisito parcial para obtenção do título de Licenciado em Licenciatura em Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR).

Orientadora: Prof. Dr<sup>a</sup>: Daniela Aline Barancelli.

Coorientador: Prof. Dr. Gideã Taques Tractz.

**CAMPO MOURÃO**

**2023**

**RENAN FERNANDO RIGUEIRA**

**SÍNTESE DE DERIVADOS DA VANILINA E APLICAÇÃO DO COMPOSTO  
(E)-4-(4-HIDROXI-3-METOXIFENIL)BUT-3-EN-2-ONA EM DISPOSITIVO  
ORGÂNICO FOTOSENSÍVEL**

Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação  
apresentado como requisito para obtenção do título  
de Licenciado em Licenciatura em Química,  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
(UTFPR).

Data de aprovação: 28/novembro/2023

Daniela Aline Barancelli  
Doutorado  
<http://lattes.cnpq.br/4995499872041179>  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná - UTFPR

Gideã Taques Tractz  
Doutorado  
<http://lattes.cnpq.br/5932164789161002>  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná - UTFPR

Estela dos Reis Crespan  
Doutorado  
<http://lattes.cnpq.br/5093731613842088>  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná - UTFPR

Adriano Lopes Romero  
Doutorado  
<http://lattes.cnpq.br/9305249774964216>  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná - UTFPR

**CAMPO MOURÃO**

**2023**

## RESUMO

RIGUEIRA, Renan Fernando. **Síntese de derivados da vanilina e aplicação do composto (*E*)-4-(4-hidroxi-3-metoxifenil)but-3-en-2-ona em dispositivo orgânico fotossensível**. 2023. Trabalho de Conclusão de Curso (Licenciado em Licenciatura em Química), Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Campo Mourão, 28/11/2023.

A vanilina é o principal componente responsável pelo aroma da baunilha, mas também é um reagente versátil para a síntese orgânica. Neste trabalho, foi extraída a vanilina do açúcar de baunilha como alternativa para a obtenção da vanilina e caracterizou-se a amostra por meio do aferimento do ponto de fusão. Sintetizou-se três compostos derivados da vanilina (utilizando a vanilina de fonte comercial) sendo que os compostos (*E*)-4-(4-hidroxi-3-metoxifenil)but-3-en-2-ona (**2**) e o (1*E*, 4*E*)-1-(4-hidroxi-3-metoxifenil)-5-fenilpenta-1,4-dien-3-ona (**5**) foram sintetizados por meio de reações de condensação aldólica, e o composto (*E*)-2-metoxi-4-(3-oxobut-1-en-1-il)acetato de fenila (**4**) por meio de uma reação de acetilação do composto 2. Os compostos 2 e 4 foram sintetizados com rendimentos de 80% e 71%, respectivamente. Não foi possível determinar o rendimento do composto 5. Todos os compostos sintetizados foram caracterizados por meio de aferição do ponto de fusão e espectrometria de massa. O composto 2 foi caracterizado adicionalmente por, espectroscopia de infravermelho e ressonância magnética nuclear de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ . O composto 2 foi testado como material fotossensibilizador em uma Célula Solar Sensibilizada por Corante (CSSC), apresentando como parâmetros eletroquímicos um potencial de 0,5 V e uma corrente de 0,3 mA cm<sup>-2</sup>. Esses resultados são promissores, tratando-se de um composto de baixo custo que pode ser utilizado como padrão para a síntese de outras moléculas com potencial aplicabilidade, visando melhorar suas propriedades como corante.

Palavras-chave: CSSC; (*E*)-4-(4-hidroxi-3-metoxifenil)but-3-en-2-ona; síntese orgânica; vanilina.

( X ) Autorizo a disponibilização do seguinte correio eletrônico para contato:

renan.fernando1997@gmail.com

## ABSTRACT

RIGUEIRA, Renan Fernando. **Synthesis of vanillin derivatives and application of the compound (*E*)-4-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)but-3-en-2-one in a photosensitive organic device.** 2023. Final Course Work (Degree in Chemistry), Federal Technological University of Paraná, Campo Mourão, 28/11/2023.

Vanillin is the main component responsible for the aroma of vanilla, but it is also a versatile reagent for organic synthesis. In this work, vanillin was extracted from vanilla sugar as an alternative to obtaining vanillin and the sample was characterized by measuring its melting point. Three compounds derived from vanillin were synthesized (using vanillin from a commercial source): (*E*)-4-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)but-3-en-2-one (**2**) and (1*E*, 4*E*)-1-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-5-phenylpenta-1,4-dien-3-one (**5**) were synthesized via aldol condensation reactions, and compound (*E*)-2-methoxy-4-(3-oxobut-1-en-1-yl)phenyl acetate (**4**) via an acetylation reaction of compound 2. Compounds 2 and 4 were synthesized with yields of 80% and 71%, respectively. It was not possible to determine the yield of compound 5. All the compounds synthesized were characterized using melting point measurement and mass spectrometry. Compound 2 was further characterized by infrared spectroscopy and  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  nuclear magnetic resonance. Compound 2 was tested as a photosensitizing material in a Dye Sensitized Solar Cell (DSSC), with electrochemical parameters of a potential of 0.5 V and a current of 0.3 mA cm<sup>-2</sup>. These results are promising, since this is a low-cost compound that can be used as a standard for the synthesis of other molecules with potential applicability, with the aim of improving its properties as a colorant.

Keywords: DSSC; (*E*)-4-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)but-3-en-2-one; organic synthesis; vanillin.