

SÍNTESE DE ORGANOCATALISADORES AMINO SULFONICOS E APLICAÇÃO NA REAÇÃO DE BIGINELLI

Porciuncula, Larissa M.; Hack, Carolina R. L.; Barros, Bruno G.; Weber, Andressa C. H.;
Montes D'Oca, Marcelo G. (orientador)
lary.porciuncula@hotmail.com

Evento: Mostra da Produção Universitária
Área do conhecimento: Ciências exatas e da terra

Palavras-chave: Organocatálise, diidropirimidinonas, ácidos graxos

1 INTRODUÇÃO

A organocatálise vem ganhando destaque, devido à capacidade apresentada por moléculas orgânicas de baixo peso molecular em catalisar uma ampla gama de reações químicas mimetizando o papel do sítio ativo de uma enzima. Uma reação organocatalisada é aquela onde qualquer processo de catálise é efetuado por moléculas orgânicas e livre de metais¹.

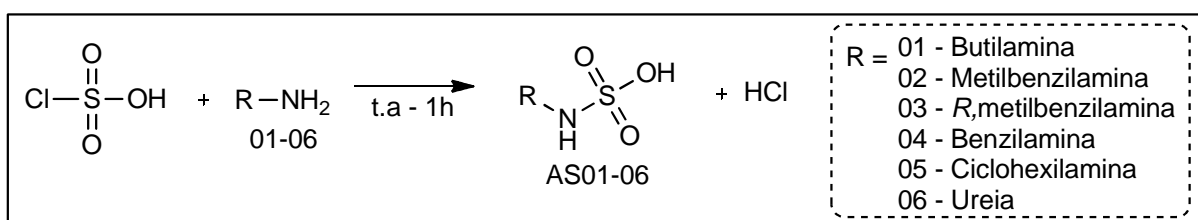
Uma das reações em que a organocatálise vem sendo aplicada é a Reação de Biginelli para obtenção de diidropirimidinonas (DHPMs). As DHPMs são heterociclos nitrogenados que despertam interesse em Química Orgânica e Medicinal por apresentarem uma variedade ampla de propriedades farmacológicas importantes.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Atualmente é de grande interesse na área da química orgânica a busca por catalisadores que melhorem o rendimento da reação de Biginelli e que sejam ambientalmente corretos e de baixo custo. Dentre as variações catalíticas mais importantes destacam-se os ácidos de Bronsted, ácidos de Lewis,³ líquidos iônicos,⁴ biocatalisadores e, nos últimos anos, os organocatalisadores.¹

O ácido sulfâmico, é um catalisador versátil bastante utilizado na síntese de DHPMs e apresenta resultados muito satisfatórios, no entanto, tem algumas desvantagens tal como sua hidrólise no meio reacional.⁵ Visando minimizar tais aspectos, este trabalho tem por objetivo a síntese de novos organocatalisadores baseados em ácido sulfâmico, aplicados a síntese de 3,4-Diidropirimidinonas, bem como a investigação da sua eficiência.

2 MATERIAIS E MÉTODOS (ou PROCEDIMENTO METODOLÓGICO)



Esquema 1. Síntese do Organocatalisador

Um screening para determinar o melhor organocatalisador foi realizado, a partir da reação multicomponente de Biginelli, utilizando, ureia, benzaldeído e acetoacetato de metila ou acetoacetato esteárico, na presença dos

organocatalisadores e metanol, sob refluxo e agitação constante, e promovendo a síntese de 3,4-diidropirimidin-2(1*H*)-onas graxas e não graxas.

Os catalisadores e as diidropirimidinonas foram caracterizados e elucidados estruturalmente através de ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN ¹H) e de carbono (RMN ¹³C) e espectrofotometria de infravermelho (IV).

4 RESULTADOS e DISCUSSÃO

Os catalisadores aminosulfônicos AS01-06 foram sintetizados obtendo um rendimento entre 73-92%. Os experimentos mostraram até o momento uma eficiência satisfatória na capacidade catalítica desses novos compostos quando utilizados na reação de Biginelli, conforme se observa na tabela 1. Para estudos comparativos a reação foi realizada na ausência do catalisador mostrando um rendimento de 9%, bem como com ácido sulfâmico.

Tabela 1 – Screening dos organocatalisadores.

Entrada	Acetoacetato	Catalisador	Mol%	Rendimento	Tempo (h)
1	Me	-	-	9%	6
2	Me	NH ₂ SO ₃ H	10%	84%	6
3	Me	AS01	10%	57%	6
4	Me	AS01	20%	75%	6
5	Me	AS02	10%	49%	6
6	Me	AS02	20%	68%	6
7	Me	AS03	10%	54%	6
8	Me	AS03	20%	67%	6
9	Me	AS04	10%	69%	6
10	Me	AS04	20%	79%	6
11	Me	AS05	10%	45%	6
12	Me	AS05	20%	65%	6
13	Me	AS06	10%	47%	6
14	Me	AS06	20%	52%	6
15	Estearico	NH ₂ SO ₃ H	20%	76%	24
16	Estearico	AS01	20%	80%	24
17	Estearico	AS02	20%	56%	24
18	Estearico	AS03	20%	53%	24
19	Estearico	AS04	20%	79%	24
20	Estearico	AS05	20%	72%	24

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

De acordo com os resultados pode se observar que o catalisador AS04 tem um potencial catalítico próximo ou superior ao ácido sulfâmico, sendo que a diferença nos resultados é mais pronunciada quando o tempo reacional é maior.

REFERÊNCIAS

- ¹ Schreiner, P.R. *Chemical Society Reviews* 2003, 32, 289.
- ² Mayer, T.U.; Kapoor, T.M.; Haggarty, S.J.; King, R.W.; Scheiber, S.L.; Mitchison, T.J.; *Science* 1999, 286, 971.
- ³ Tu, S.; Fang, F.; Miao, C.; Jiang, Feng, Y.; Shi, D.; Wang, X. *Tetrahedron Letter* 2003, 44, 6153.
- ⁴ Saha, S.; Moorthy, J. N. *Journal Organic Chemistry* 2011, 76, 396.
- ⁵ Montes D'Oca, M.G.; Soares, R.M.; Moura, R.R.; Granjão, V. F.; *Fuel* 2012, 97, 884.