

## 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 metais<sup>1</sup>.

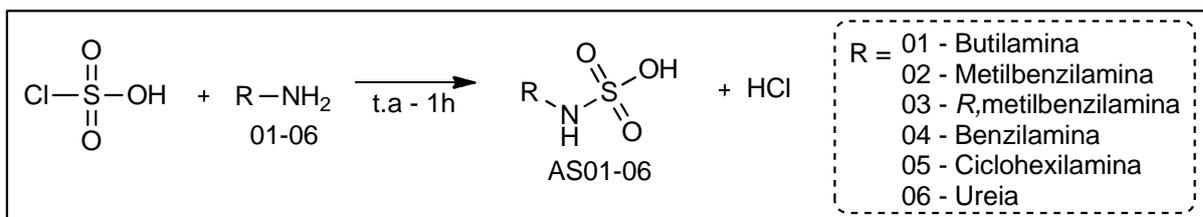
Uma das reações em que a organocatálise vem sendo aplicada é a Reação de Biginelli para obtenção de diidropirimidinonas (DHPMs). As DHPMs são heterociclos nitrogenados que despertam interesse em Química Orgânica e Medicinal por apresentarem uma variedade ampla de propriedades farmacológicas importantes.

### 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,<sup>3</sup> líquidos iônicos,<sup>4</sup> biocatalisadores e, nos últimos anos, os organocatalisadores.<sup>1</sup>

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.<sup>5</sup> 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 <sup>1</sup>H) e de carbono (RMN <sup>13</sup>C) 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 <sub>2</sub> SO <sub>3</sub> 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%	<b>79%</b>	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 <sub>2</sub> SO <sub>3</sub> H	20%	76%	24
16	Estearico	AS01	20%	<b>80%</b>	24
17	Estearico	AS02	20%	56%	24
18	Estearico	AS03	20%	53%	24
19	Estearico	AS04	20%	<b>79%</b>	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

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