

13ª Mostra da Produção Universitária

Rio Grande/RS, Brasil, 14 a 17 de outubro de 2014.

SÍNTESE DE 1,3-DIELETRÓFILOS VIA ACILAÇÃO DE ACETAIS, PARA A OBTENÇÃO DE HETEROCICLOS GRAXOS

Roig, Esther M e Bareño, Valéria Oliveira.
Flores, Alex Fabiani Claro
thetyroig@gmail.com

Evento: 13ª Mostra da Produção Universitária
Área do conhecimento: Química

Palavras-chave: síntese; acilação; graxas.

1 INTRODUÇÃO

Este trabalho apresenta a síntese de compostos carbonílicos α,β -insaturados graxos via acilação de acetais, a partir de aldeídos graxos e as análises estruturais realizadas até o momento em nosso laboratório de pesquisa. O desenvolvimento do trabalho visa à obtenção de heterociclos substituídos com cadeias graxas, bem como as suas aplicações tecnológicas e biológicas.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

A síntese de heterociclos tem sido de grande interesse para a química orgânica, em virtude de sua vasta aplicação nos diversos campos da química moderna e suas novas tecnologias.¹ Entre os compostos heterociclos, destacam-se os compostos nitrogenados, que desempenham importante papel, na Química Medicinal. No entanto, apesar das inúmeras pesquisas desenvolvidas com heterociclos, apenas recentemente a obtenção e derivatização de heterociclos com longas cadeias alifáticas e/ou substituintes derivados dos ácidos, ésteres e aminas graxas começam a despertar o interesse dos pesquisadores, especialmente químicos sintéticos.² Essas substâncias graxas apresentam várias aplicabilidades dentre elas: lubrificantes, detergentes, aditivos para combustíveis além de aplicações tecnológicas. Em relação a atividades biológicas, a síntese e os estudos preliminares da relação estrutura-atividade mostraram que os compostos com cadeias graxas, são altamente potentes contra alguns tipos de vírus como (HIV-1).³

3 MATERIAIS E MÉTODOS

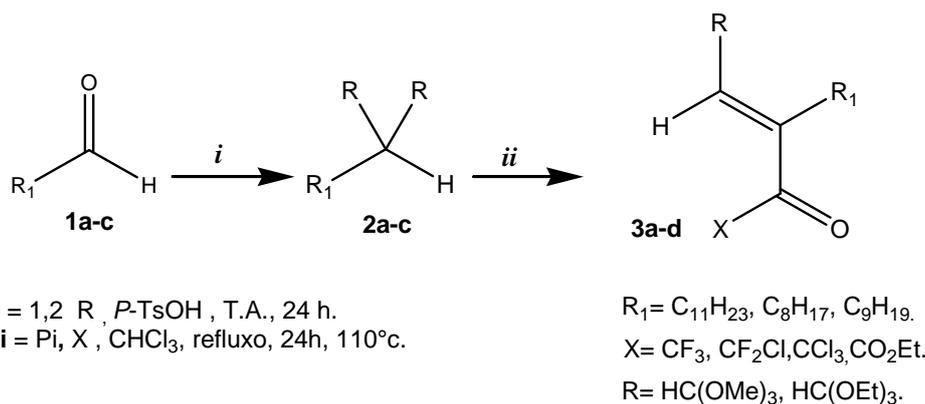
Para obtenção dos precursores, foi realizado primeiramente a síntese dos acetais **2a-c**, a partir dos aldeídos, nonanal, decanal e láurico **1a-c**. Logo após os precursores **3a-d**, foram sintetizados em refluxo de clorofórmio por 24 h, utilizando-se como agentes acilantes, cloreto de tricloroacetila, anidrido trifluoracético, anidrido clorodifluoracético e clorooxoacetato de etila. Após o tempo de reação a mistura foi lavada com água destilada (3x10mL), a fase orgânica separada, seca com sulfato de sódio e o solvente removido em evaporador rotativo. Os produtos foram obtidos na forma de óleos.

4 RESULTADOS e DISCUSSÃO

13ª Mostra da Produção Universitária

Rio Grande/RS, Brasil, 14 a 17 de outubro de 2014.

Acetais **4a-c**, foram sintetizados, a partir da reação dos respectivos aldeídos graxos **1a-c**, com trietilortoformiato, na presença de ácido *p*-toluenossulfônico conforme Esquema 1. Acilação dos acetais, para a obtenção dos precursores, com objetivo de obtenção dos compostos heterociclos nitrogenados com cadeias graxas, foram obtidos com os respectivos agentes acilantes, e piridina utilizando como solvente clorofórmio. A mistura reacional foi mantida sob aquecimento em constante agitação por 24 horas a 60-80°C, conforme Esquema 1. Estes foram obtidos com bons rendimentos de 47-89%. A estrutura das substâncias foi confirmada através de espectros de RMN de ^1H e ^{13}C .



Esquema 1: Síntese dos 1,3-dieletrófilos.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O método de acilação de acetais é amplamente utilizado na funcionalização de carbonilas, e mostrou-se eficiente também na funcionalização de aldeídos graxos como apresentado neste trabalho. Embora existam muitas classes de compostos heterociclos, poucas substâncias com longas cadeias alifáticas têm sido sintetizadas e estudadas resultando em aplicações, assim a continuação do desenvolvimento do trabalho visa a perspectiva de obtenção dos compostos heterociclos com longas cadeias alifáticas, contribuindo para o aumento da biblioteca dessa classe de compostos.

REFERÊNCIAS

1. Ayoob Bazgir, A.; Ahadi, S.; Ghahremanzadeh R.; Reza, H.; Mirzaei, P.; *Ultrasonics Sonochem.* **2010**, *17*, 447.
2. (a) Flores, A. F. C.; Malavolta, J. L.; Souto, A. A.; Goularte, R. B.; Flores, D. C.; Piovesan, A. A. *J. Braz. Chem. Soc.*, **2013**, *24*, n 4, 580. (b) Flores, A. F. C.; Piovesan, L. A.; Pizzuti, L.; Flores, D. C.; Malavolta, J. L.; Martins, M. A. P. *J. Heterocycl. Chem.* **2014**.
3. (a) Mack, H.; Pfeiffer, M.; Hornberger, W.; Böhn, H. J.; Höffken, H. W. *J. Enzyme Inhib.* **1995**, *9*, n 1, 73. (b) Tran, J. A.; Tucci, F. C.; Jiang, W.; Marinkovic, D.; Chen, C. W.; Arellano, M.; Markison, S.; Fleck, B. A.; Wen, J.; White, N. S.; Pontillo, J.; Saunders, J.; Marks, D.; Hoare, S. R.; Madan, A.; Foster, A. C.; Chen, C. *Bioorg. Med. Chem.* **2007**, *15*, 5166.