

Introdução

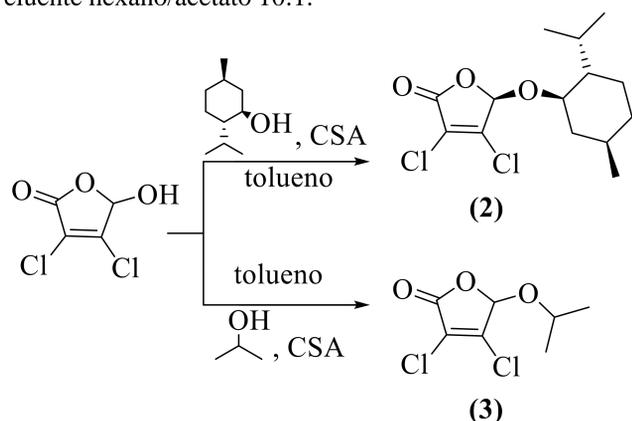
Uma em cada nove pessoas no mundo não têm comida suficiente para levar uma vida saudável e ativa de acordo com a FAO (2015) e as projeções populacionais indicam crescimento acelerado e contínuo nas próximas décadas, o que deve elevar a demanda de alimentos em geral¹. Uma prática comum na atividade agropecuária para aumentar a produção agrícola é o controle químico de plantas daninhas, fungos, ácaros e insetos². Na busca por novos compostos a serem utilizados no controle químico nota-se que os butenolídeos possuem diversas atividades biológicas como fungicida, bactericida, anti-inflamatória, citotóxica, antimalárica, analgésico e reguladora de germinação de sementes e por isso têm atraído atenção como alvo sintético^{3,4}.

Objetivo

- Síntese dos compostos: (R) -3,4-dicloro-5 – (((1R, 2R, 5S) -2-isopropil-5-metilciclo-hexil) oxi) furan-2 (5H) -ona, (S) -3,4-dicloro-5 – (((1R, 2R, 5S) -2-isopropil-5-metilciclo-hexil) oxi) furan-2 (5H) -ona, 3,4-dicloro-5-oxo-2,5-di-hidrofuran-2-ilo e do 3,4-dicloro-5-isopropoxifuran-2 (5H) -ona e caracterização por RMN de ¹H e ¹³C.

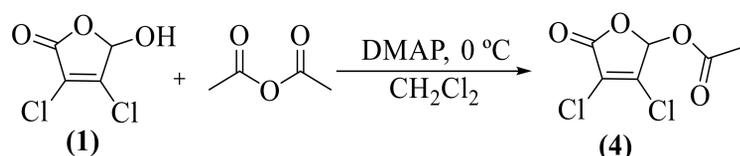
Metodologia

Na primeira etapa foi realizada a síntese dos compostos (R) -3,4-dicloro-5 – (((1R, 2R, 5S) -2-isopropil-5-metilciclo-hexil) oxi) furan-2 (5H) -ona (**2**) e do (S) -3,4-dicloro-5 – (((1R, 2R, 5S) -2-isopropil-5-metilciclo-hexil) oxi) furan-2 (5H) -ona (**3**), através da reação de 1 mmol de ácido mucoclórico (**1**) com 0,8 mmol do mentol ou 2 mmol álcool isopropílico. A reação foi solubilizada em tolueno e catalizada por ácido canfrosulfônico (CSA), mantida sob agitação e aquecimento e refluxo com Dean-Stark por 5 horas e em atmosfera de N₂ (**Esquema 1**). Dado o fim da reação, o solvente foi retirado em evaporador rotatório e os compostos (**2**) e (**3**) purificados em coluna cromatográfica de sílica gel com eluente hexano/acetato 10:1.



Esquema 1: Preparação dos compostos **2** e **3**

Outra síntese realizada foi a do 3,4-dicloro-5-oxo-2,5-di-hidrofuran-2-ilo (**4**). Nessa reação foi preparada um solução de 1 mmol de ácido mucoclórico em diclorometano. A mistura resultante foi mantida sob agitação e banho de gelo até total dissolução do material de partida. Em seguida, foram adicionados 1,6 mmol de anidrido acético e 0,3 mmol de DMAP. O óleo obtido foi purificado em coluna cromatográfica de sílica gel com eluente hexano/acetato 3:2 v/v (**Esquema 2**).



Esquema 2: Preparação do composto **4**

Resultados

A obtenção dos compostos (**2**) e (**3**) foram realizadas através da conversão da hidroxila do ácido mucoclórico, através de uma reação de eterificação. Essa consiste na desidratação catalisada pelo ácido canforosulfônico, seguida da adição dos álcoois. Nessa reação foi obtido um óleo amarelo com rendimentos de 50 % e 85 % respectivamente. A reação do composto (**4**) é caracterizada pela conversão da hidroxila do ácido mucoclórico em um grupo acetilalcoxi, através da reação de esterificação catalisada por DMAP obtendo um óleo amarelo com rendimento de 80 %. Os compostos **2**, **3** e **4** foram caracterizados com RMN de ¹H e de ¹³C. A título de exemplo será discutido o RMN de ¹H e de ¹³C do composto (**3**) (**Figuras 1 e 2**).

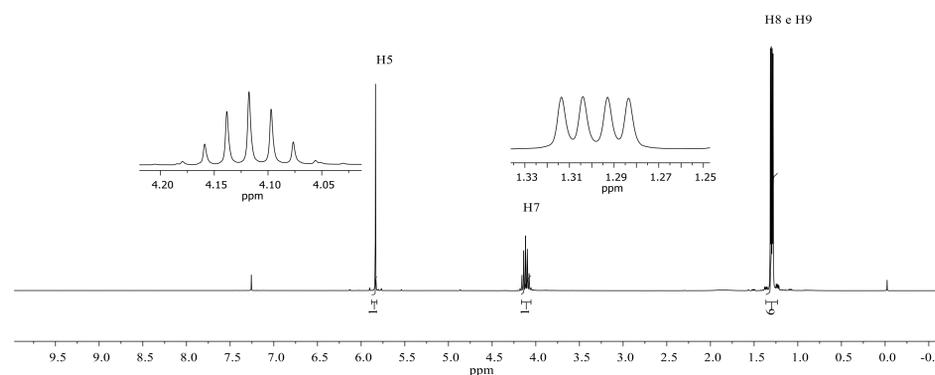
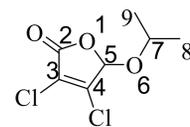


Figura 1: Espectro RMN ¹H do composto **2**

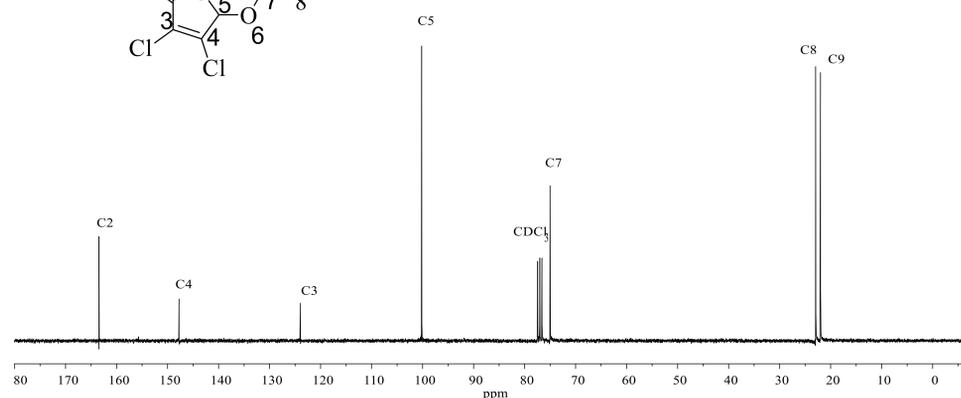
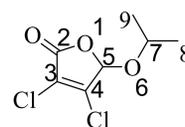


Figura 2: Espectro RMN ¹³C do composto **2**

No espectro de RMN ¹H (**Figura 1**), apresenta um simpleto em δ 5,84 integrado para um hidrogênio referente ao H5 e um quarteto em δ 1,3 referentes aos hidrogênios H8 e H9 dos grupos propóxi integrado para 6 hidrogênios. É possível observar no espectro de RMN ¹³C em δ 163,83 um sinal referente ao carbono da carbonila C2, em δ 147,83 e 124,30 nota-se dois sinais referentes aos carbonos da dupla ligação C4 e C3 e em δ 100,08, 22,94 e 21,98 os carbonos C5, C8 e C9 aos carbonos ligados ao grupo propóxi.

Conclusão

Podemos concluir com este trabalho a síntese de 4 novos compostos que um bom rendimento. Além de ter grande possibilidade para atividade herbicida e inseticida ainda se ter a possibilidade de outras etapas de síntese com compostos, como reações de Diels-Alder, reações de substituição do cloro.

Referências

- SAATH, K. C. O. e FACHINELLO, A. L. *Rev. Econ. Sociol. Rural*, 56 (2), apr-jun 2018
- LORENZON, J. *Evidencia*, v.16, n.1, p.54, 2016.
- EI-TOMBARY et al., 2011; FLEMATTI et al., 2004; LIGHT et al., 2009; WEBER et al., 2002, NOGUEIRA E LOPES, 2011, HUSAIN et al, 2005
- BELLINA et al., 2001

Apoio e Financiamento