

Simpósio de Integração Acadêmica

“Ciências Básicas para o Desenvolvimento Sustentável”

SIA UFV 2023



REAÇÃO MULTICOMPONENTE DE POVAROV PARA AGREGAR VALOR À REJEITOS AGROINDÚSTRIAS: SÍNTESE DE TETRAIDROQUINOLINAS COMO POTENCIAIS INIBIDORES DE UREASE DO SOLO

Rafaela Rodrigues Danta Silva; Sergio Antonio Fernandes; Walysson Ferreira de Paiva

Email: Rafaela.dantas@ufv.br; santonio@ufv.br; walysson.paiva@ufv.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG, 36570-900, Brasil.

Grande Área: Ciências exatas e da terra; Área temática: Química Orgânica; Categoria: Pesquisa

Sustentabilidade; Química-verde; Fertilizantes

Introdução

Reações multicomponentes (RMC's)

As RMC's são processos que permitem a incorporação, em uma única etapa, da maioria dos átomos de três ou mais reagentes, obtendo um produto complexo com características de cada um dos reagentes (Figura 1). Algumas vantagens das RMC's em relação a síntese clássica, são: menor número de etapas, simplicidade e segurança na execução, alta eficiência e economia atômicas, menor utilização de solventes e bons rendimentos.



Figura 1 - (a) síntese tradicional linear e (b) síntese multicomponente.

Calix[n]arenos

Calix[n]arenos (Figura 2) são uma classe de organocatalisadores que nos últimos anos vem sendo empregados com sucesso em reações multicomponentes. Neste trabalho, o ácido *p*-sulfônico calix[4]areno foi empregado como organocatalisador em reações tricomponentes de Povarov para a síntese de tetraidroquinolinas.

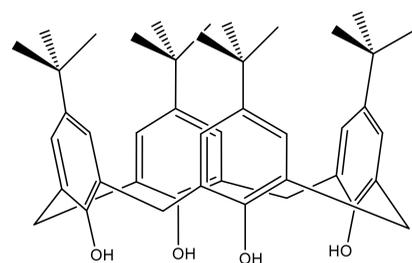


Figura 2 - Estrutura do calix[4]areno.

Objetivos

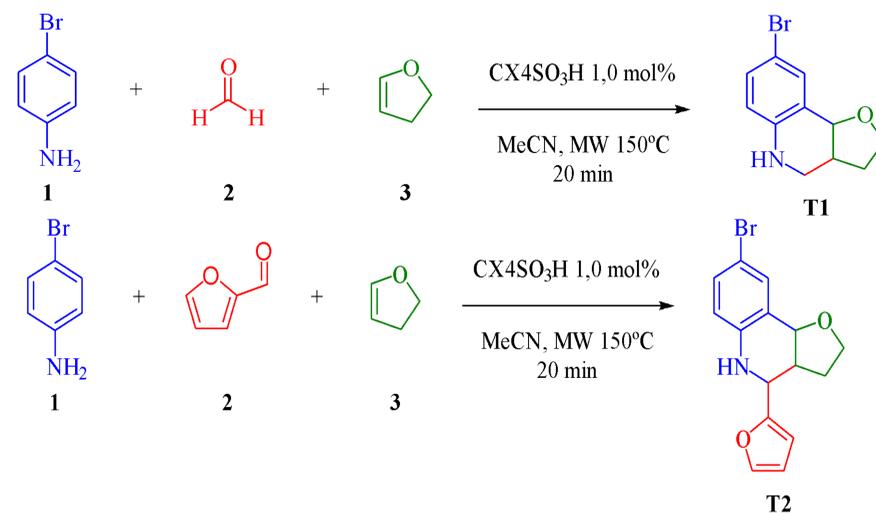
O presente trabalho tem como objetivo desenvolver uma metodologia para a síntese de diferentes tetraidroquinolinas a partir de substratos advindos da biomassa (furfural) e posterior avaliação das potenciais atividades como inibidor da enzima urease do solo.

Metodologia

A um tubo de 10 mL específico para o reator de micro-ondas (marca CEM), foram adicionados 0,5 mmol de 4-bromoanilina, 1,5 mmol do aldeído (furfural ou formaldeído), 1,5 mmol de 2,3-diidrofurano, 1,0 mol% do catalisador CX4SO₃H e 2 mL de acetonitrila. Utilizou-se o método padrão para um sistema fechado, com agitação magnética por 20 minutos a uma temperatura de 150 °C e potência máxima de 50 W. Ao término da reação, o solvente foi removido em evaporador rotatório e o bruto reacional foi extraído com diclorometano (3x10 mL) e solução aquosa saturada com cloreto de sódio a fim de se remover o catalisador. Os produtos foram purificados através de coluna cromatográfica de sílica-gel (70-230 mesh) como fase estacionária, obtendo as tetraidroquinolinas.

Resultados e Discussão

Inicialmente, foram avaliadas as proporções entre os substratos nas seguintes condições reacionais: carga de catalisador fixada em 1,0 mol %, temperatura de 150°C, 50W de potência de micro-ondas, 20 minutos de reação e acetonitrila como solvente, posteriormente foram avaliados diferentes solventes, tempo reacional, temperatura, potências de micro-ondas e diferentes catalisadores. A condição de reação otimizada foi: proporção entre os reagentes (4-bromoanilina, formaldeído ou furfural e 2,3-diidrofurano) de 1:1:1, 2 mL de acetonitrila, catalisador CX4SO₃H a 1 mol%, aquecimento por irradiação de micro-ondas a 50W, temperatura de 150°C por 20 minutos.



Síntese da T1 e T2 com as condições otimizadas. Fonte: Elaborado pela autora, 2022

Conclusões

Neste trabalho foram sintetizadas duas tetraidroquinolinas (THQ's) por meio da reação multicomponente de Povarov com aquecimento por irradiação de micro-ondas. Para uma das THQ's utilizou como substrato o furfural, substrato obtido a partir da biomassa. As THQ's sintetizadas T1 e T2 foram isoladas e caracterizadas por Espectrometria de Massas e Ressonância Magnética Nuclear de ¹H e os rendimentos obtidos foram de 52 e 43%, respectivamente.

Bibliografia

ABRANCHES, P. A. D. S. et al. Calix[n]arene-Catalyzed Three-Component Povarov Reaction: Microwave-Assisted Synthesis of Julolidines and Mechanistic Insights. *Journal of Organic Chemistry*, v. 83, n. 4, p. 1761-1771, 16 fev. 2018.

Agradecimentos

