

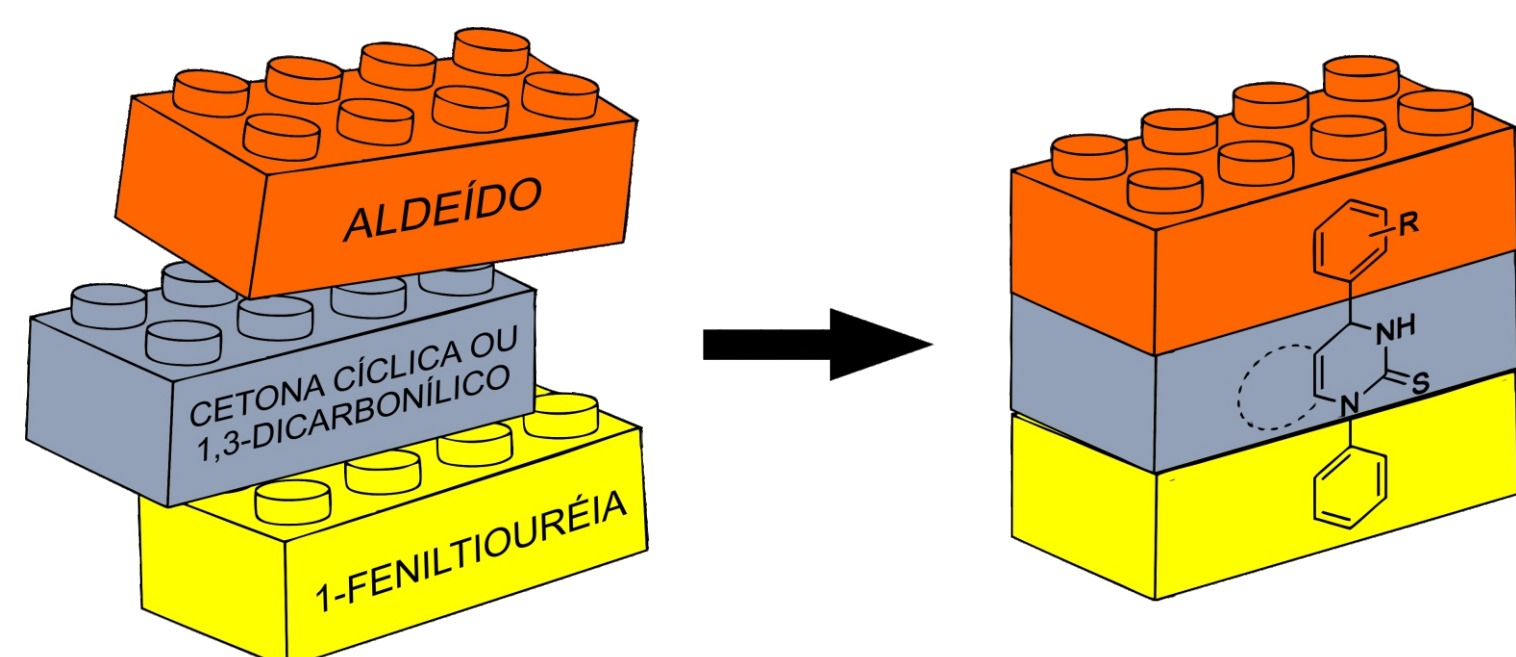
VERSATILIDADE DA REAÇÃO DE BIGINELLI: USO DE DIFERENTES CETONAS PARA A SÍNTESE DE NOVAS BIFENIL DIIDROPIRIMIDIN-2-TIONAS

Davi, L.; Gonçalves, I. L.; Canto, R. F. S.; Eifler-Lima, V. L.

INTRODUÇÃO

A reação multicomponente de Biginelli envolve a síntese de diidropirimidinonas (DHPMs) catalizada por ácido empregando aldeídos, uréia e análogos e compostos com hidrogênio metileno ativo^[1].

Utilizando cloreto de trimetilsilano como promotor reacional e dimetilformamida como solvente, é possível obter DHPMs N-1 substituídas^[2].



METODOLOGIA

Para obtenção dos compostos, utilizou-se cloreto de trimetilsilano (TMSCl) como promotor da reação e dimetilformamida (DMF) em temperatura ambiente por 72h. As cetonas acetilacetona (1), 1,3-ciclohexanodiona (2), ciclohexanona (3) e tetralona (4) reagiram com os benzaldeídos (6) (7) e (8) contendo grupos retiradores e doadores de elétrons e feniltiouréia (5).

RESULTADOS

A Figura 1 propõe mecanismos pelos quais os produtos puderam ser obtidos. Os rendimentos variam de bom a ótimo conforme a Tabela 2 e os produtos foram caracterizados espectroscopia de ¹H NMR (Figura 2).

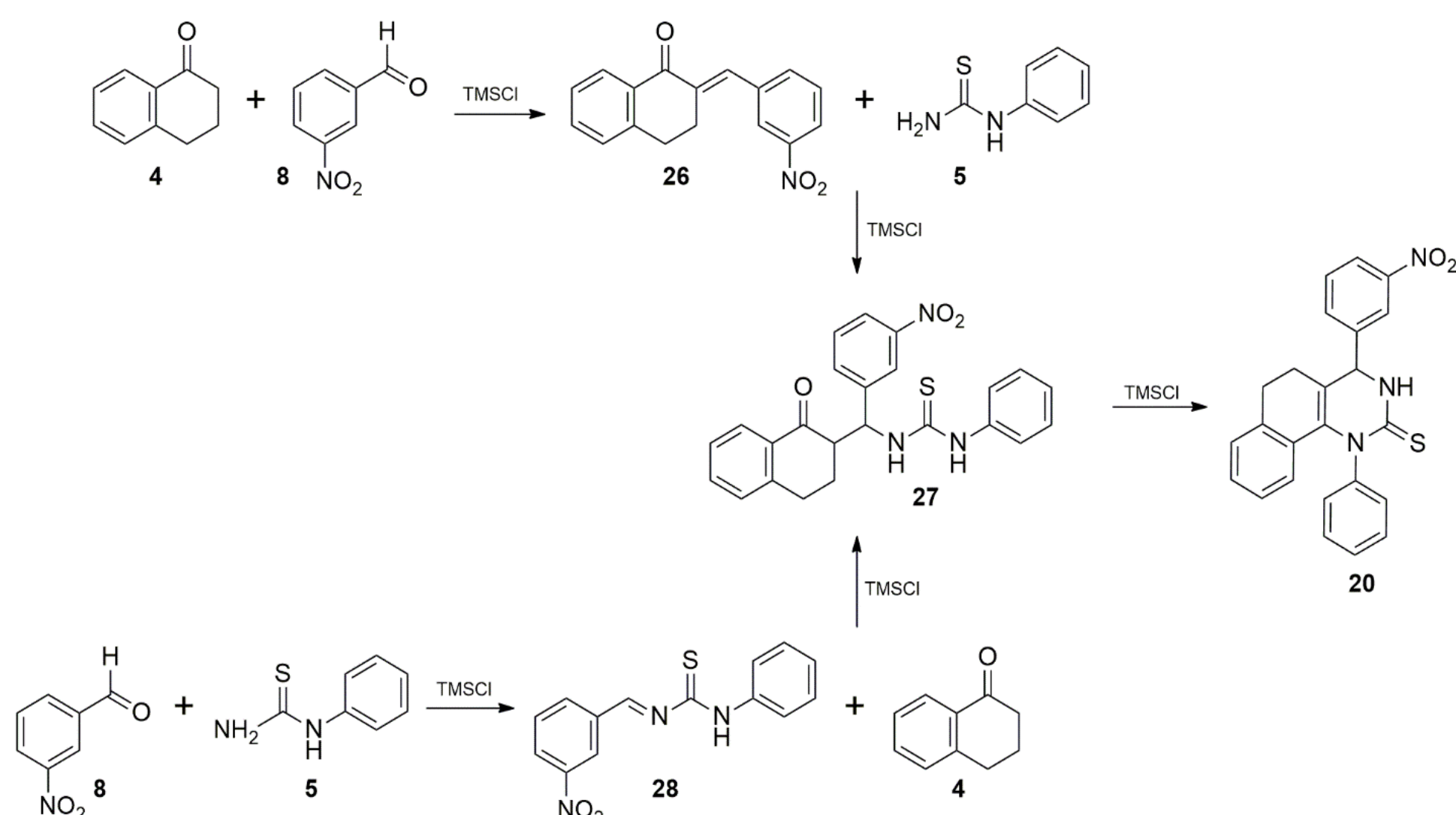


Figura 1: Mecanismos propostos para a reação utilizando o composto (20) como exemplo.

| REAGENTES | PRODUTOS | | |
|---|---------------|---------------|---------------|
| R= H (6), OH (7), NO ₂ (8) | Rend: 56% | Rend: 61% | Rend: 76% |
| R= H (6), OH (7), NO ₂ (8) | Rend: 65% | Rend: 58% | Rend: 52% |
| R= H (6), OH (7), NO ₂ (8) | Rend: 81% | Rend: 67% | Rend: 69% |
| R= H (6), OH (7), NO ₂ (8) | Rend: 42% | Rend: 49% | Rend: 65% |

Tabela 1: Estrutura dos produtos e rendimentos

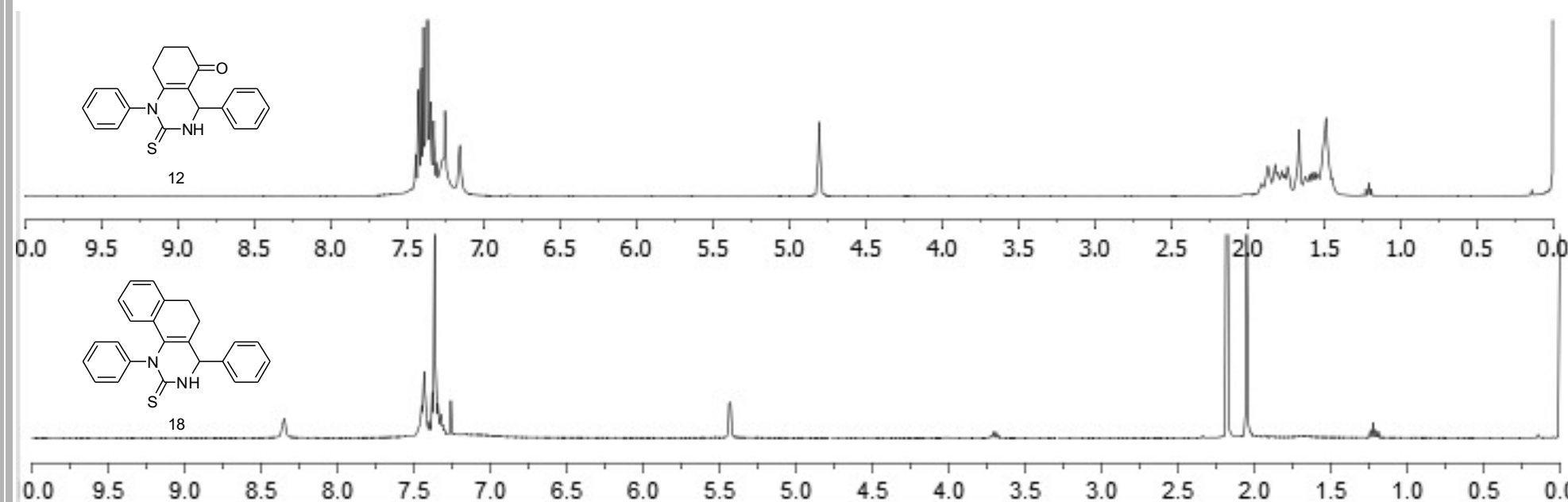


Figura 2: Espectros de ¹H NMR dos compostos (12 e 18)

CONCLUSÃO

A reação de Biginelli é uma ferramenta poderosa para obter-se diversidade química de maneira rápida, econômica e com bons rendimentos, facilitando a síntese de quimiotecas amplas e focadas, em pouco tempo.

REFERÊNCIAS

- Nagarajiah, H.; Mukhopadhyay, A.; Moorthy, J. N. *Tetrahedron Lett*, 2016, 57, 5135.
- Gonçalves, I.; Rockenbach, L.; das Neves, G.; Göethel, G.; Soares do Nascimento, F.; Porto Kagami, L.; Figueiró, F.; Oliveira de Azambuja, G.; de Fraga Dias, A.; Amaro, A.; de Souza, L.; da Rocha Pitta, I.; Avila, D.; Kawano, D.; Garcia, S.C.; Battastini, A. M. O.; Eifler-Lima, V. L. *MedChemComm*, 2018, v. 9, p. 995-1010, 2018.