

SÍNTESE DE ACETOACETAMIDAS VISANDO NOVOS BLOCOS DE CONSTRUÇÃO PARA REAÇÕES MULTICOMPONENTE

Stephanie Aguiar¹ e Cedric Graebin²

¹ Aluna de Iniciação Científica, curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; ² Professor do DEQUIM/UFRRJ.

Palavras-chave: Biginelli; reações multicomponente; acetoacetamidas; aminólise de ésteres.

Introdução

Reações multicomponente (RMCs) são reações onde três ou mais reagentes (componentes) são adicionados ao mesmo tempo, levando a formação de um produto resultante da união destes materiais de partida. Por sua eficiência e versatilidade, as RMCs são amplamente utilizadas para a síntese de novos compostos orgânicos. A reação de Biginelli é uma das mais conhecidas entre as RMCs. Ela consiste na reação entre uréia, aldeído e um composto β -dicarbonílico, originando uma dihidropirimidinona com vários grupos funcionais acoplados à mesma. O monastrol é um exemplo de dihidropirimidinona obtida a partir desta reação, apresentando a capacidade de afetar a divisão celular, sendo um potencial agente anticâncer.

O objetivo deste trabalho é, utilizando-se do Monastrol como composto-protótipo, a síntese de tetrahidropirimidinona-5-carboxamidas (**4**, Esquema 2), a partir do emprego de acetoacetamidas como componente β -dicarbonílico da reação.

Metodologia

A partir do acetoacetato de etila, a primeira estratégia empregada foi a síntese das acetoacetamidas planejadas a partir da reação de aminólise dos ésteres, conforme protocolos estabelecidos (Esquema 1).

Resultados e Discussão

A reação entre acetoacetato de etila **1** e anilina foi estudada em diferentes condições. Em microondas (100 W, 150 °C), por 25 minutos e em 150 °C, obteve-se um produto precipitado. No entanto, na análise em cromatografia gasosa com espectro de massa, algumas reações apresentaram como produto uma mistura complexa de difícil separação, enquanto que em outros casos obteve-se o produto **2**, resultado da aminólise e condensação (imina).

Esquema 1.

A partir destes primeiros resultados, propôs-se uma mudança na rota sintética (Esquema 2), que consiste em fazer primeiramente a reação de Biginelli e a partir da tetraidropirimidinona-5-carboxilato de etila obter diretamente a 5-carboxamida a partir de uma reação de aminólise. Estas reações estão em andamento atualmente.

Esquema 2.

Conclusão

Com os resultados obtidos nesse trabalho, concluiu-se que as vias utilizadas não foram satisfatórias. A nova rota de síntese já está sendo estudada e com ela espera-se obter as pirimidinona-carboxamidas planejadas.

Referências bibliográficas

- DALLINGER, D. Creating chemical diversity space by scaffold decoration of dihydropyrimidines. In: Pure and Applied Chemistry, Vol. 77, No. 1, 2005.
- MEENACHI, S. Synthetic Studies on [2, 6]Naphthyridine Compounds and its Derivatives - Synthesis of 5-Hydroxybenzo [c][2,6]Naphthyridine 1,4-dione. In: Chemical Science Review and Letters, Vol. 3, 2014.
- KAPPE, O. C. The Biginelli Reaction. In: Multicomponent Reactions, 2005.