

Mayara de Souza Siqueira^{1*} (IC), Luiz Carlos da Silva Filho¹ (PQ)

*may.siqueira.09@gmail.com

¹FC-UNESP-Bauru, Av. Eng. Luiz Edmundo Carrijo Coube, 14-01 – Vargem Limpa – CEP 17033-360 – Bauru, SP/Brasil

Palavras Chave: Cumarinas, Pentacloreto de nióbio, Reações Multicomponentes.

Introdução

As cumarinas e seus derivados são compostos naturais que podem ser encontrados em várias plantas e possuem propriedades anti-inflamatórias, antioxidantes, anticoagulantes, antibióticas, imunomodulatórias, antimicrobianas, antiviral e broncodilatadores, sendo assim amplamente aplicadas na medicina.¹ Os compostos cumarínicos e seus derivados têm despertado o interesse de um grande número de grupos de pesquisa, na área de novos materiais, pela possibilidade de seu uso como corantes sensibilizadores em células solares (DSSC) e lasers.²

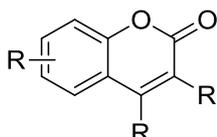


Figura 1: Estrutura básica das cumarinas.

Recentemente nosso grupo de pesquisa demonstrou que derivados de 4-aryl-3,4-di-hidroumarinas podem ser preparados, pela reação multicomponente (RMC) entre 3,5-dimetóxi-fenol, derivados de benzaldeído e malonato de dimetila na presença de NbCl₅ em condições brandas de reação.^{3,4}

Com base nesses resultados, e no intuito de tentar entender melhor este tipo de reação, demos continuidade aos nossos estudos variando-se o tipo de derivado fenólico e o derivado de benzaldeído utilizado, para que possamos verificar qual é o efeito destas modificações estruturais no rendimento do produto formado e no tempo reacional.

Resultados e Discussão

As RMCs foram realizadas entre o 3,4,5-trimetóxi-fenol (**4**), malonato de dimetila (**5**) e os derivados de benzaldeído (**6 a-j**) para a obtenção dos derivados de 4-aryl-3,4-di-hidroumarinas (esquema 1) sob atmosfera de N₂, à temperatura ambiente, com agitação constante e utilizando CH₂Cl₂ anidro como solvente. Utilizou-se o NbCl₅ na proporção de 1 equivalente em mol para o derivado de fenólico utilizado, com um tempo reacional de 96 horas.



Esquema 1: RMCs para a síntese de derivados de 4-aryl-3,4-di-hidroumarinas na presença de NbCl₅.

Os resultados obtidos em nossos testes reacionais estão mostrados na tabela 1.

Tabela 1. Dados obtidos nas RMCs estudadas.

Aldeído	R ₁	R ₂	R ₃	Rend. (%)
6a	H	H	H	95 (7a)
6b	Br	H	H	80 (7b)
6c	F	H	H	89 (7c)
6d	Cl	H	H	78 (7d)
6e	OMe	H	H	79 (7e)
6f	Me	H	H	76 (7f)
6g	N(CH ₃) ₂	H	H	70 (7g)
6h	<i>t</i> -But	H	H	75 (7h)
6i	Me	Me	Me	54 (7i)
6j	SCH ₃	H	H	64 (7j)

A tabela 1 mostra que o NbCl₅ promove a RMC estudada com bons rendimentos e um bom tempo reacional em condições reacionais brandas. O único resultado que mostrou uma discrepância comparada aos demais foi na reação utilizando o aldeído **6i**, este fato é explicado pelo alto impedimento estérico causado pelos grupos metila nas posições R₂ e R₃.

Conclusões

Os resultados obtidos mostram que o NbCl₅ é um excelente agente promotor para a síntese de derivados de 4-aryl-3,4-di-hidroumarinas através de reações multicomponentes.

Agradecimentos

FAPESP, CNPq, CAPES e CBMM.

¹ Ribeiro, C. V. C.; Kaplan, M. A. C. *Quim. Nova* **2002**, *25*, 533

² Liu, X.; *et al.* *J. Phys. Chem. A* **2012**, *116*, 727.

³ dos Santos, W. H.; da Silva-Filho, L. C. *Synthesis* **2012**, *44*, 3361.

⁴ dos Santos, W. H.; Siqueira, M. S.; da Silva-Filho, L. C. *Quim. Nova* **2013**, *36*, 1303.