

## Utilização de Princípios da Química Verde na Reação de Gewald

Isadora S. Luna (IC)<sup>1\*</sup>, Francisco J. B. Mendonça-Junior (PQ)<sup>1</sup>.  
[\\*isadora.luna@hotmail.com](mailto:isadora.luna@hotmail.com)

<sup>1</sup> Laboratório de Síntese e Vetorização de Moléculas, Universidade Estadual da Paraíba, João Pessoa/PB 58020-540, Brazil.

Palavras Chave: química verde, reação de Gewald, 2-amino-tiofeno, bicarbonato de sódio.

### Introdução

Atividades produtivas na área da química normalmente são causadoras de risco à saúde humana e poluição ao meio ambiente, visto que trabalha com substâncias tóxicas e/ou inflamáveis. A Química Verde é uma estratégia importante no que diz respeito à preservação do meio ambiente, uma vez que desenvolve metodologias e/ou processos eficazes e alternativos que visam a redução ou eliminação da quantidade de reagentes tóxicos e inflamáveis prejudicial à saúde humana e ao meio ambiente<sup>1</sup>. Um dos grandes desafios dos químicos sintéticos atuais é a incorporação das metodologias convencionais em metodologias verdes na construção de novas substâncias sintéticas utilizadas no desenvolvimento de novos fármacos. A Reação de Gewald, trata-se de uma reação multicomponentes envolvendo aldeídos ou cetonas, um componente metileno ativo, enxofre elementar em meio básico, que gera como produto 2-amino-tiofenos, que são amplamente utilizados como intermediários sintéticos nos setores agroquímico, farmacêutico e para dispositivos ópticos-eletrônicos. Nesse trabalho visamos desenvolver uma metodologia para realização da Reação de Gewald, fazendo a substituição das tradicionais bases orgânicas utilizadas (morfolina, trietilamina), por uma base inorgânica.

### Resultados e Discussão

Nesse estudo, 3 aductos de Gewald amplamente descritos na literatura (6CN, 7CN e 8CN), foram sintetizados através de duas metodologias distintas, a convencional, utilizando morfolina como base orgânica e uma alternativa fazendo o uso de bicarbonato de sódio (NaHCO<sub>3</sub>) (Figura 1). Reações foram monitoradas por CCD e os produtos purificados através do mesmo procedimento.<sup>2,3</sup> Foram comparados, os rendimentos e o tempo reacional, assim como os pontos de fusão, como indicativos de pureza.



Figura 1. Reação de Gewald.

**Tabela 1.** Apresenta os dados comparativos dos rendimentos e pontos de fusão das duas metodologias para a síntese das moléculas alvo.

	6CN	7CN	8CN
Rend. Convencional (%)	70	55,8	65,5
P.F. (°C)	147-148	115,2-124,2	98-102
Rend. Q.V. (%)	100	91	69,3
P.F. (°C)	147-150	120-124	105

A utilização do NaHCO<sub>3</sub> como base alternativa permitiu obter os compostos: i) em mesmo tempos reacionais (2hs para 6CN e 3hs para 7CN e 8CN); ii) em rendimentos iguais ou superiores; iii) em grau de pureza equivalente (analisado por CCD e faixa de fusão). Como o NaHCO<sub>3</sub> apresenta como vantagens adicionais ser um reagente muito mais barato, praticamente atóxico para os humanos e o meio ambiente, solúvel em água, e ausente de odor, avaliamos que sua utilização é extremamente vantajosa para a condução da Reação de Gewald, principalmente para reações em grande escala.

### Conclusões

Os compostos foram sintetizados em excelentes rendimentos (69,3-100%), curtos tempos reacionais e elevados graus de pureza, comparáveis aos outros métodos já descritos na literatura, demonstrando que o NaHCO<sub>3</sub> é uma alternativa, mais barata, menos tóxica, portanto ecologicamente correta para a realização da Reação de Gewald e obtenção de 2-amino-tiofenos.

### Agradecimentos

PIBIC/UEPB/CNPq PRPGP/UEPB

<sup>1</sup> Torresi, S. I.; Cordoba, D.; Pardini, V.L.; Ferreira, V.F. *O que é sustentabilidade?*. *Quím. Nova*. **2010**, vol.33, n.1.

<sup>2</sup> Gewald, K. *2-Amiono-thiophene aus oxo-mercaptanen und methylenaktiven nitrilen*. *Chem. Ber.* **1965**. V. 98, p. 3571-7.

<sup>3</sup> Gewald, K.; Schinke, E.; Bottcher, H. *2-Amiono-thiophene aus methylenaktiven nitrilen, Carbonylverbindungen und schwefel*. *Chem. Ber.* **1966**. V. 99, p. 94-100.