Desenvolvimento, síntese e aplicação de novos organocatalisadores bifuncionais

Marcia Fulas* **(PG), Alessandro Rodrigues (PQ) *marcia.fulas@unifesp.br**

Universidade Federal de São Paulo – Unifesp, Diadema – SP, Brasil.

Palavras Chave: *síntese orgânica; catálise estereosseletiva; clausenamida*

Introdução

A catálise estereosseletiva enquadra-se nos princípios da química verde, ao empregar catalisadores tão seletivos quanto possível.

Este trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de novos organocatalisadores para aplicação na síntese controlada dos estereoisômeros de um intermediário para a síntese da clausenamida, um alcalóide presente no extrato das folhas da *Clausena lansium* [1]. Dentre seus diversos usos, destacam-se o tratamento de hepatites virais, asma, gripe, desordens intestinais, dermatites e mais recentemente comprovou-se seu efeito hepatoprotetor [2].

Resultados e Discussão

A primeira etapa deste trabalho implicou no planejamento de uma classe de organocatalisadores tendo o 1,8-diaminoantraceno como plataforma.

Um organocatalisador ideal deve ser capaz de agir enantiosseletivamente, ou seja, deve ser capaz de agir como ácido ou base de Bronsted quando necessário.

O aspecto crucial deste trabalho consiste na avaliação das conformações mais estáveis entre organocatalisador + substrato, a fim de verificar se essas combinações permitem que os reagentes assumam uma geometria favorável à ocorrência da reação. Um estudo preliminar de modelagem molecular indicou alguns possíveis grupos funcionais como potenciais candidatos a serem conectados à plataforma 1,8-diaminoantraceno (Figura 1).

Para a síntese do grupo funcional guanidina, os isômeros *R,R* e *S,S*-DPEN foram preparados utilizando procedimentos padrão [3].

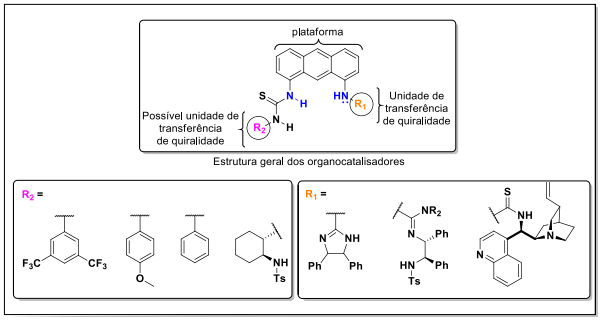
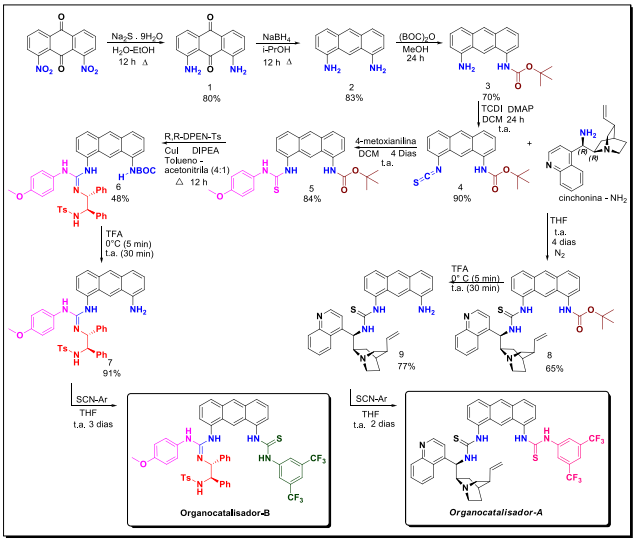


Figura 1. Substituintes propostos.

Os organocatalisadores **A** e **B** foram sintetizados em 7 e 8 etapas, respectivamente, a partir da 1,8-dinitroantraquinona (Esquema 1). A próxima etapa consiste na avaliação desses organocatalisadores na reação do tipo Michael entre o malonato de dimetila e o β-nitroestireno.



Esquema 1. Síntese dos organocatalisadores **A** e **B**.

Conclusões

O estudo de modelagem molecular juntamente com as análises de espectrometria de massas indicou que os organocatalisadores preditos podem ser efetivos em reações bifuncionais considerando seu comportamento de ácido e base de Bronsted. Contudo, os testes ainda estão em desenvolvimento para confirmar estas previsões experimentalmente.

Agradecimentos

À FAPESP, pelo financiamento do projeto (Proc. 13/10073-5) e à CAPES (M.F.) pela bolsa

---

[1] Hartwig, W.; Born, L. *J. Org. Chem.* **1987**, *52*, 4352-4358.

[2] Yang, L.; Wang, D.-X.; Zheng, Q.-Y.; Pan, J.; Huang, Z.-T.; Wang, M.-X. *Org. Biomol. Chem.* **2009**, *7*, 2628-2634.

[3] Pikul, S.; Corey, E. J. *Org. Synth.* **1993**, *71*, 22-29