

Síntese Multicomponente de 2,4,5-Trifenilimidazol Catalisada por $CeCl_3 \cdot 7H_2O$.

Marcelo Volpatto Marques^{1,2*} (PG), Djhon Cirilo Librelotto^{1,3} (IC), Luiz Antonio Mazzini Fontoura^{1,3} (PQ) e Dennis Russowsky² (PQ).

marcelovolp@hotmail.com

1. Dep. de Engenharia de Processos, Fundação de Ciência e Tecnologia (CIENTEC)
2. Dep. de Química Orgânica, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)
3. Curso de Química, Universidade Luterana do Brasil (ULBRA)

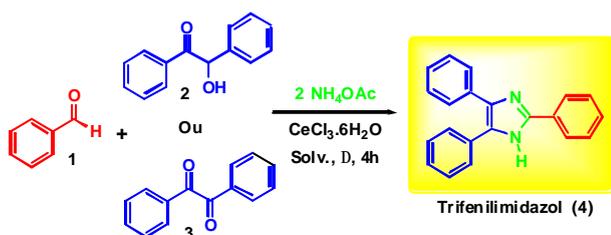
Palavras Chave: imidazol, $CeCl_3$, ácidos de Lewis, benzoína, benzila

Introdução

Os triarilimidazóis são heterociclos que possuem largo espectro de aplicação. São compostos fotossensíveis utilizados em fotografia, por exemplo, além de apresentarem atividades herbicida, fungicida, antiinflamatória e anti-câncer.¹

Recentemente, estes imidazóis têm sido sintetizados via reações multicomponentes entre aldeídos aromáticos, amônia ou aminas primárias e um composto 1,2-diaril-dicarbonílico ou 2-hidróxi-2-fenil-acetofenonas. Diversos ácidos de Lewis como $AlCl_3$, $FeCl_3$, $LaCl_3$ e $Yb(OTf)_3$ tem sido reportados na literatura como catalisadores desta reação.²

Neste trabalho, foi estudado o uso do $CeCl_3 \cdot 7H_2O$ como catalisador na reação entre o benzaldeído (1), benzoína (2) ou benzila (3) e acetato de amônio. Além do substrato, foram estudadas as quantidades de catalisador e da fonte de amônia. Uma representação geral da reação é mostrada no **Esquema 1**, abaixo.



Esquema 1. Obtenção do 2,4,5-trifenilimidazol (4)

Resultados e Discussão

As reações foram conduzidas sob refluxo e acompanhadas por CCD (AcOEt 2 % em CH_2Cl_2 , revelado em solução de 2,4-dinitrofenilidrazina ou câmara de I_2). Quando EtOH foi usado como solvente, observou-se a precipitação do produto e após 4 h, a CCD indicou o consumo total do material de partida e a reação foi interrompida por adição de água.

O sólido amarelo claro foi isolado por filtração e sua caracterização e pureza foram confirmadas por CG/EM. Quando AcOH foi usado como solvente, não se observou a precipitação do produto. Ao contrário,

75 % do substrato foram recuperados após o mesmo tempo de reação.

Os resultados da investigação das quantidades de catalisador e NH_4OAc utilizadas nestas reações são mostradas na **Tabela 1**, abaixo.

Tabela 1. Condições de Síntese do 2,4,5-Trifenilimidazol

Ent.	Substr	Catal. (mol%)	NH_4OAc (Equiv.)	Solv.	Rend. (%)
1	2	5	4	EtOH	72
2	2	10	4	EtOH	84
3	2	10	10	EtOH	73
4	2	10	4	HOAc	-
5	3	10	4	EtOH	73

Quando etanol foi utilizado como solvente, os rendimentos variaram entre 72 e 84 % e o uso de AcOH não levou ao isolamento do produto esperado. O aumento da quantidade de catalisador de 5 para 10 mol% foi acompanhado de um incremento no rendimento.

O aumento da concentração da fonte de amônia, por outro lado, levou a um efeito contrário. O uso de benzila (3) como substrato conduziu ao produto com rendimento pouco inferior.

O estudo de outros catalisadores ácidos de Lewis está sob investigação.

Conclusões

A reação de condensação entre benzaldeído e benzoína na presença de NH_4OAc catalisada por $CeCl_3 \cdot 7H_2O$ levou ao 2,4,5-trifenilimidazol com bons rendimentos. O melhor resultado foi obtido utilizando EtOH como solvente, 4 equivalentes da fonte de amônia e 10 mol% do catalisador.

Agradecimentos

Os autores agradecem a Fapergs e CNPq.

¹ King, A.J. *et al. Cancer Res.* 2006, 66, 11100.

² a) Wang, L.-M. *et al. J. Fluor. Chem.* **2006**, *127*, 1570. b) De Luca, L. *Curr. Med. Chem.* **2006**, *13*, 1.