

Obtenção de 2-oxazolina por decomposição térmica de éster

Nathália S. de Araújo¹ (IC), Lucienir P. Duarte² (PQ), Fernando Carazza² (PQ), Adriana A. Okuma^{1*} (PQ) akemi@deii.cefetmg.br

¹ Departamento de Química / CEFET-MG / Campus I, Av. Amazonas, 5253 – BH/MG – CEP 30.241-169

² Departamento de Química / UFMG / Campus da Pampulha, Av. Antônio Carlos, 6627 – BH/MG – CEP 30.270-901

Palavras Chave: *alcatrão vegetal, 2-oxazolina, éster, Síntese Orgânica, Química Verde.*

Introdução

A obtenção de intermediários químicos a partir do alcatrão de *Eucalyptus*, um co-produto da carbonização da madeira, tem despertado interesse devido à utilização de uma fonte renovável de biomassa como insumo químico. O ácido 3,4,5-trimetoxibenzóico é um dos principais compostos obtidos a partir do alcatrão vegetal, após este ser submetido a etapas de destilação fracionada, O-metilação e oxidação benzílica. O ácido 3,4,5-trimetoxibenzóico apresenta um grande potencial como intermediário químico, uma vez que anéis aromáticos trimetoxilados fazem parte de muitas substâncias naturais com atividade biológica comprovada e vários produtos de transformação têm sido preparados e comercializados como fármacos.¹ Com o intuito de desenvolver metodologias que promovam o uso do alcatrão vegetal como insumo químico, este trabalho relata uma rota alternativa para a obtenção 2-oxazolin, importantes intermediários em síntese orgânica, a partir da decomposição térmica de ésteres.

Resultados e Discussão

Dentre as várias metodologias relatadas na literatura² para a síntese de 2-oxazolin destaca-se o método direto, que utiliza ácidos carboxílicos e beta-amino-alcoóis como materiais de partida, sendo de grande interesse devido ao baixo custo. Outro procedimento muito utilizado consiste na conversão de ácidos carboxílicos em cloretos de acila, seguida da reação com o aminoálcool desejado. A hidroxiamida resultante pode ser submetida a diferentes condições de ciclodesidratação para formar a 2-oxazolina correspondente. Entretanto, os dois métodos descritos apresentam como desvantagem as condições experimentais da etapa de ciclodesidratação, que requer altas temperaturas e geralmente é promovida por agentes azeotrópicos ou outros agentes desidratantes. Para eliminar este problema, realizamos a decomposição térmica de ésteres e verificamos que esta seria uma alternativa mais branda para a obtenção de 2-oxazolin, considerando que a ciclização ocorreria com a eliminação de ácido carboxílico, um bom grupo

abandonador. A metodologia utilizada neste trabalho envolve a conversão do ácido 3,4,5-trimetoxibenzóico **1** no cloreto de 3,4,5-trimetoxibenzoíla, seguida da reação deste cloreto com o 2-amino-2-metil-propan-1-ol para a obtenção do 3,4,5-trimetoxibenzoato de 2-metil-2-[(3,4,5-trimetoxibenzoil)amino]propila **2**. Os estudos mostraram que a decomposição térmica do éster **2** realizada a 180 °C, durante 10 min, produz a 4,4-dimetil-2-(3,4,5-trimetoxifenil)-2-oxazolina **3** como produto principal (Fig. 1). As reações foram monitoradas por CCD. Os intermediários e produtos de reação foram caracterizados por CGAR. A etapa de decomposição apresentou 93% de conversão (CGAR) do éster em 2-oxazolina. Comparando-se esta metodologia com outras utilizadas anteriormente por nós (Tab. 1) pode-se verificar que a decomposição do éster apresentou menor tempo de reação e maior rendimento.

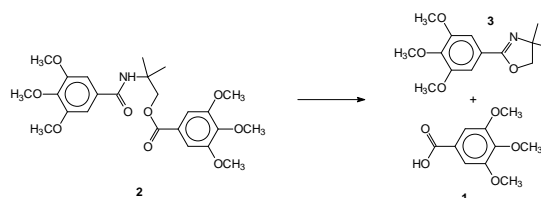


Figura 1. Decomposição do éster em 2-oxazolin.

Tabela 1. Etapa de ciclização – condições experimentais e rendimentos

Condições experimentais	Rend.
Ausência de solvente, refluxo 6 h ¹	16%
Xileno, Dean-Stark, refluxo 6 h ¹	68%
<i>t</i> -BuONa/ <i>t</i> -BuOH, refluxo 30 min ¹	78%
Ausência de solvente, 180 °C, 10 min	92%

Conclusões

A decomposição térmica do éster **2** foi eficiente para a obtenção da 2-oxazolin **3**, apresentando vantagens em relação aos métodos tradicionais.

Agradecimentos

FAPEMIG, DPPG/CEFET-MG.

¹ Okuma, A.A. Estudo da fração siringila do alcatrão de *Eucalyptus* sp. como insumo químico. Belo Horizonte: UFMG/ICEx/Química, 2004. 246p. (Tese)

² Meyers, A.I. e Gant, T.G. *Tetrahedron* **1994**, 50, 2297.