

Cinética da Reação de Biginelli com um Catalisador de Ferro Ionicamente Marcado

Luciana M. Ramos^{*1} (PG), Rafael G. da Silva²(PQ), Brenno A. D. Neto¹(PQ)

¹Laboratório de Química Medicinal e Tecnológica (LaQuiMeT), Instituto de Química, Universidade de Brasília (IQ-UnB).

² Department of Biochemistry, Albert Einstein College of Medicine of Yeshiva University (USA)

* email: lucianamramos@hotmail.com

Palavras Chave: Biginelli, Dihidropirimidinonas, líquidos iônicos, cinética de reação.

Introdução

Sínteses de Dihidropirimidinonas (DHPMs), tornaram-se alvo sintético em grupos de pesquisas devido às propriedades farmacológicas dessa classe de composto.¹ Embora a literatura retrate várias metodologias, não existe nenhum estudo cinético para a reação de Biginelli. Neste sentido, para contribuir de forma mais significativa para o estudo dessa reação, uma cinética global é apresentada.

Resultados e Discussão

As reações foram conduzidas variando-se as concentrações de cada reagente (Figura 1), sendo que utilizado inicialmente 3 mmol de cada um dos reagentes. Os resultados obtidos, com as variações de concentração dos reagentes foram fitados em uma equação sigmoideal clássica conforme a equação: $Y = A/(1 + Be^{-kt})$.

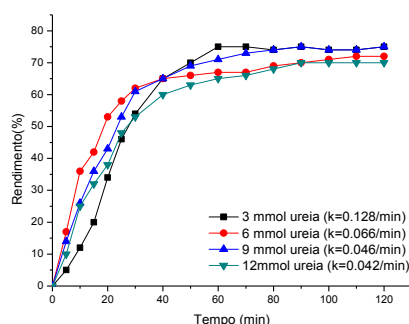
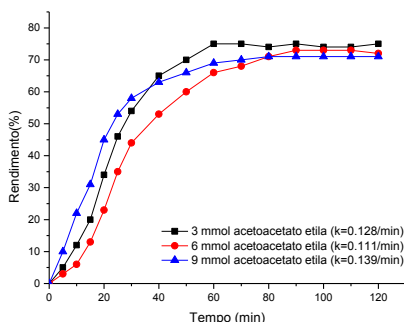
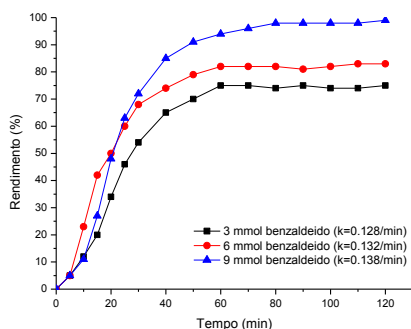


Figura 1. Gráficos de rendimento vs. tempo com a variação da concentração dos substratos

Através dos valores de constante (k) obtidos (Figura 2), percebe-se claramente que o único reagente que tem influência significativa para a velocidade da reação é a uréia.

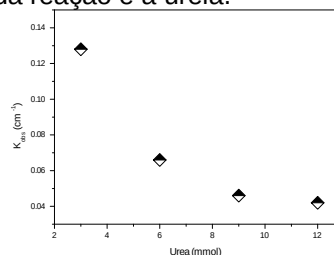


Figura 2: Gráfico de dependência de concentração da uréia vs. constante cinética obtida.

Com excesso de uréia no meio reacional, o aldeído é consumido mais rapidamente.

Conclusões

A partir da concentração de 9 mmols de uréia, não há mais aumento da velocidade reacional. Outro fato importante observado foi que somente a presença em excesso do benzaldeído levou a rendimentos maiores em apenas 2 h de reação.

Agradecimentos

Ao CNPq, FAPDF e CAPES pelo apoio financeiro.

¹ Kappe, C.O., *J. Org. Chem.* **1997**, 62, 7201

² Cepanec, I, Litvic', M, Litvic', M.F, Grungold, I, *Tetrahedron*. **2007**, 63, 11822.