

Influência do solvente alcoólico na formação de γ -nitroésteres via uma nova reação multicomponente

Caroline R. Montes D'Oca¹ (PG)*, Fabrício F. Naciuk² (PG), Celso C. Moro¹ (PQ) e Dennis Russowsky¹ (PQ). E-mail: caroline.ros@hotmail.com

¹Laboratório Sínteses Orgânicas, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil. ²Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, Campinas, SP.

Palavras Chave: Reações multicomponentes, hidrotalcitas, nitroésteres

Introdução

Os γ -nitroésteres (GNE) são intermediários-chave na síntese de análogos do ácido γ -aminobutírico (GABA), principal neurotransmissor inibitório do sistema nervoso central, cuja deficiência está associada a distúrbios neurológicos.¹ Em estudos anteriores, foi desenvolvida uma estratégia para a síntese destes compostos baseada na reação multicomponente entre aldeídos **1**, ácido de Meldrum (**2**), nitrometano (**3**), empregando hidrotalcita (HT-Mg-Al) como catalisador heterogêneo. As reações efetuadas em EtOH(**4**) como solvente levaram à formação dos respectivos ésteres etílicos **5** em uma única etapa em rendimentos moderados, sugerindo a incorporação do solvente à estrutura do produto.²

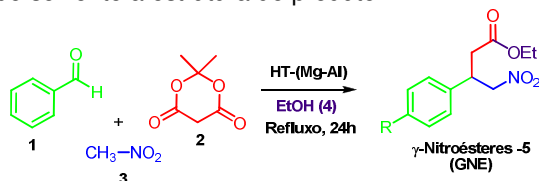


Figura 1. Síntese multicomponente de GNE catalisada por HT.

Resultados e Discussão

Para confirmar a participação do solvente alcoólico com reagente procedeu-se a reação entre o aldeído **1a** (1,0 mmol), o ácido de Meldrum (**2**, 1,0 mmol), nitrometano (**3**, 5,0 mmol) utilizando MeOH (**4a**, 5,0 ml) como solvente com catalise de HT (50 mg) sob condições de refluxo durante 24 h.

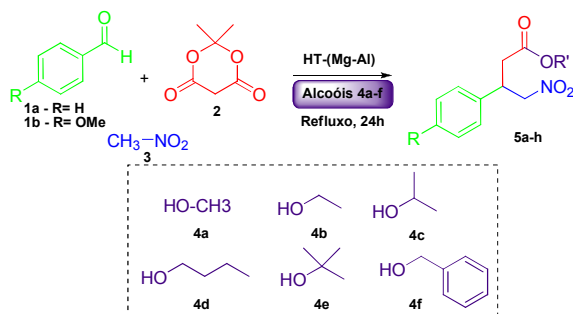


Figura 2. Síntese multicomponente dos GNE **5a-h**

O produto foi purificado por cromatografia em coluna levando ao γ -nitroéster metílico **5a** em 84%
35ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

de rendimento. A utilização de **1b** nas mesmas condições levou a formação de **5b** em 72% (Tabela 1, entradas 1 e 2, respectivamente). Reações na presença dos álcoois **4b-f** também foram investigadas e os resultados são mostrados na Tabela 1.

Tabela 1. Nitroésteres **5 a-h** sintetizados

Ent.	Álcool	Ald.	Nitroéster	R	Rend. (%)	
1	4a	MeOH	1a	5a	H	84%
2	4a	MeOH	1b	5b	OMe	72%
3	4b	EtOH	1a	5c	H	85%
4	4b	EtOH	1b	5d	OMe	67%
5	4c	iPrOH	1a	5e	H	80%
6	4c	iPrOH	1b	5f	OMe	54%
7	4d	t-BuOH	1a	5g	H	68%
8	4d	t-BuOH	1b	-	OMe	N.O*
9	4e	n-BuOH	1b	5h	OMe	25%
10	4f	BnOH	1b	-	OMe	N.O*

*Não observada formação do produto.

A obtenção dos nitroésteres foi influenciada pela presença do substituinte ligado ao anel aromático e à natureza estérica do álcool. Em todos os casos, a presença do substituinte metoxila ligado ao anel aromático levou a rendimentos menores (entradas 2, 4 e 6 respectivamente) ou até na ausência da formação de produto quando álcoois mais impedidos estericamente foram empregados (entrada 8). O uso de n-BuOH forneceu baixo rendimento e o emprego de BnOH também não levou a formação de nenhum produto (entradas 9 e 10, respectivamente).

Conclusões

A natureza do álcool demonstrou influência no processo, permitindo a preparação de diferentes ésteres indicando sua participação em uma das etapas que levam à formação do produto.

Agradecimentos

Ao CNPq, Fapergs e Capes, pelo auxílio financeiro e Bolsas de Estudo.

1 Foster, A. C.; Kemp, J. A. *Curr. Opin. Pharmacol.* **2006**, 6, 7;

2 Russowsky, D. ET.al.. 35ª RASBQ, 2010, Florianópolis, SC, Brasil