

1,1,1-Tricloro-4-metoxi-3-alquen-2-onas com cadeias graxas: derivatização para carboxilpirazóis e 3-oxoalcanoatos graxos.

Morgana Doneda (IC)*¹, Rogerio F. Blanco (PG)¹, Juliana L. Malavolta (PG)¹, Rayane B. Goularte (IC)¹, Alynne A. Souto (IC)¹, Alex F. C. Flores (PQ)¹. *morganadoneda@gmail.com

¹Núcleo de Química de Heterociclos, Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, Campus Camobi, Santa Maria 97105-900, RS.

Palavras Chave: substâncias graxas, longas cadeias, ciclocondensação [3+2], substituição halofórmio.

Introdução

Nossa linha de pesquisa vem sendo estruturada sobre a acilação de acetais derivados de metilcetonas, as quais originam de modo regioespecífico 1,1,1-trialo-4-alcoxi-3-alquen-2-onas, importantes compostos 1,3-dieletrófilos usados na síntese de β -dicetonas, enaminonas e diversos heterociclos trialometil substituídos.¹

O desenvolvimento de novas abordagens para introduzir funcionalidade em óleos de soja e seus derivados graxos, tem despertado o interesse de vários pesquisadores.² Dicetonas e cetoésteres de longas cadeias têm sido relatadas como componentes da cera de várias espécies de cereais, incluindo o trigo, cevada, aveia, dentre outros³.

Os heterociclos pirazolínicos são grupamentos interessantes devido a suas conhecidas atividades biológicas. O anel pirazolínic também é um versátil intermediário sintético que pode sofrer uma série de transformações químicas úteis para a construção de muitos tipos de moléculas interessantes⁴.

Deste modo, este trabalho apresenta a síntese de 1,1,1-tricloro-4-metoxi-3-alquen-2-onas com longas cadeias alquílicas através do método de acilação de acetais, e a sua derivatização para compostos carboxilpirazóis e 3-oxoalcanoatos graxos.

Resultados e Discussão

As 1,1,1-tricloro-4-metoxi-3-alquen-2-onas com longas cadeias foram sintetizadas através da reação de acetalização de suas correspondentes cetonas (2-octanona, 2-nonanona, 2-decanona, 2-undecanona) e posterior acilação com agente acilante cloreto de tricloroacetila produzindo os produtos **1a-d**. As quais foram obtidas com mistura com as respectivas β -dicetonas **2a-d**.

Os precursores **1** e **2** foram levados à reação de ciclocondensação com cloridrato de hidrazina em álcool (MeOH e EtOH) como solvente. Os reagentes foram refluxados durante 16h e após evaporação do solvente os produtos foram isolados da mistura reacional com diclorometano lavado com água produzindo os respectivos metil- e etil-carboxilpirazóis **3a-d** e **4a-d**.

Os precursores **1** e **2**, foram levados à reação com soluções de metóxido de potássio e etóxido de potássio para substituição do halofórmio e síntese dos respectivos derivados 3-oxoalcanoatos de

metila e etila **5,7 a-d** e **6,8 a-d** através da desidratação dos precursores, conforme demonstrado na **Figura 1**.

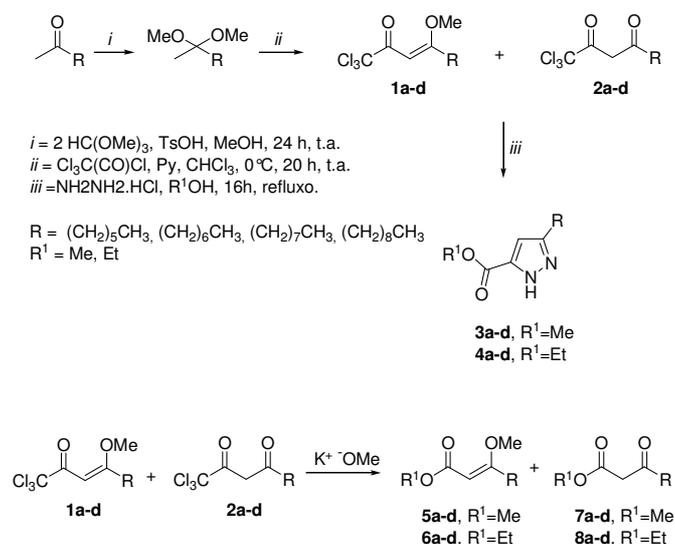


Figura 1. Síntese de carboxilpirazóis e 3-oxoalcanoatos graxos.

Conclusões

A síntese e derivatização de 1,1,1-tricloro-4-metoxi-3-alquen-2-onas com cadeias graxas (longas cadeias alquílicas) demonstrou ser uma rota original e eficiente para a obtenção de substâncias graxas inéditas, em bons rendimentos e alta pureza, com potencial de uso biológico e/ou tecnológico.

Agradecimentos

Ao financiamento do CNPq, CAPES e FAPERGS.

¹ Martins, M. A. P.; Cunico, W.; Pereira, C. M. P.; Sinhorin, A. P.; Flores, A. F. C.; Bonacorso, H. G.; Zanatta, N. *Curr Org Synth* **2004**, 1, 391.

² Biermann, U.; Friedt, W.; Lang, S.; Lühs, W.; Machmüller, G.; Metzger, J. O.; Rüsich, M.; Schäfer, H. J.; Schneider, M. P. *Angew. Chem. Int.* **2000**, 39, 2206-2224.

³ Tulloch, A. P.; *Chemistry and Biochemistry of Natural Waxes*, **1976**, 235-287.

⁴ Martins, M. A. P.; Brondani, S.; Leidens, V. L.; Flores, D. C.; Moura, S.; Zanatta, N.; Hörner, M.; Flores, A. F. C. *Can. J. Chem.* **2005**, 83, 1171-1177.