

# Estudos sobre o uso do NbCl<sub>5</sub>, como ácido de Lewis, em reações multicomponentes para a síntese de derivados de di-hidrocomarinas

Nicole Ieno Fernandes (PG), Willian Henrique dos Santos (PG) e Luiz Carlos da Silva-Filho (PQ)\*  
\*e-mail: lcsilva@fc.unesp.br

Depto. de Química, Faculdade de Ciências, UNESP, Av. Eng. Luiz E. C. Coube, 14-01, CEP 17033-360, Bauru-S.P.

Palavras Chave: Pentacloroeto de Níbio, Reações Multicomponentes, Ácido de Lewis, di-hidrocomarinas.

## Introdução

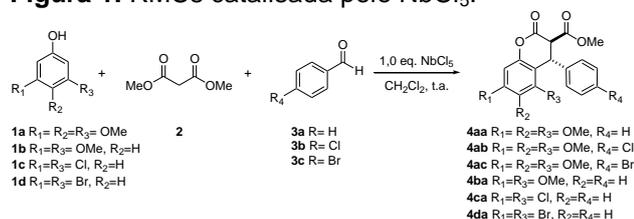
As reações multicomponentes (RMCs) são geralmente definidas como um processo em que três ou mais reagentes combinam-se em um mesmo "pot" reacional, para formar um produto que tenha características estruturais de cada reagente utilizado, gerando produtos com uma boa complexidade estrutural em apenas uma etapa.

A utilização de catalisadores (metálicos, ácidos ou enzimáticos) no desenvolvimento das RMCs tem sido alvo de pesquisas em diversos grupos de pesquisas<sup>1</sup> e neste trabalho mostramos nossos estudos sobre a aplicação do Pentacloroeto de Níbio em reações multicomponentes na preparação de derivados de 4-alkil-3,4-di-hidrocomarinas, compostos que apresentam um alto interesse farmacológico. Os derivados cumarínicos possuem propriedades anti-inflamatórias, antioxidantes, anticoagulantes, antibióticas, imunomodulatórias, antimicrobianas, antiviral e broncodilatadoras, sendo assim amplamente utilizadas na medicina.<sup>2</sup> Na indústria alimentícia as cumarinas são usadas como corantes e essências, e em bebidas alcoólicas. Na indústria de cosmético são utilizadas como fixador de perfumes e em pasta de dentes. As cumarinas também são utilizadas em borrachas sintéticas, materiais plásticos, inseticidas, detergentes, cigarros, tintas e sprays.<sup>3</sup>

## Resultados e Discussão

Neste trabalho demonstramos a utilização do Pentacloroeto de Níbio, como ácido de Lewis, nas RMCs entre compostos fenólicos (**1 a-d**), Malonato de dimetila (**2**) e derivados de benzaldeído (**3 a-c**), para a síntese de derivados de 4-alkil-3,4-di-hidrocomarinas. (Figura 1).

Figura 1. RMCs catalisada pelo NbCl<sub>5</sub>.



As RMCs foram realizadas sob atmosfera de N<sub>2</sub>, à temperatura ambiente, utilizando CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> anidro como solvente, e 1,0 equivalente de NbCl<sub>5</sub>. Os produtos obtidos foram isolados e caracterizados através de métodos espectroscópicos e espectrométricos. Os resultados obtidos são mostrados na Tabela 1.

Tabela 1. Dados obtidos para as RMCs.

Fenol	Aldeído	Tempo (dias)	Rendimento (%)
<b>1a</b>	<b>3a</b>	7	0 ( <b>4aa</b> )*
<b>1a</b>	<b>3a</b>	4	74 ( <b>4aa</b> )
<b>1a</b>	<b>3b</b>	4	71 ( <b>4ab</b> )
<b>1a</b>	<b>3c</b>	4	67 ( <b>4ac</b> )
<b>1b</b>	<b>3a</b>	2	88 ( <b>4ba</b> )
<b>1c</b>	<b>3a</b>	7	0 ( <b>4ca</b> )
<b>1d</b>	<b>3a</b>	7	0 ( <b>4da</b> )

\*Sem a presença de NbCl<sub>5</sub>.

Ao analisarmos os dados da Tabela 1, podemos verificar que o NbCl<sub>5</sub> favorece a ocorrência da RMCs para a formação dos derivados cumarínicos, que apresentam grupos metoxila no fenol utilizado como material de partida, com bons rendimentos. A presença dos grupos OMe é necessária para ativação do anel aromático fenólico, pois, quando utilizamos fenóis halogenados não foi verificada a formação das cumarinas esperadas.

## Conclusões

Os resultados obtidos até o momento mostram que o NbCl<sub>5</sub> é um ótimo catalisador para as RMCs visando a síntese dos derivados de 4-alkil-3,4-di-hidrocomarinas com bons rendimentos.

## Agradecimentos

Os autores agradecem à FAPESP e a CAPES pelo apoio financeiro, e a CBMM pelo NbCl<sub>5</sub>.

<sup>1</sup> a) Ganem, B. *Acc. Chem. Res.* **2009**, *42*, 463. b) D'Souza, D. M.; Müller, T. J. J. *Chem. Soc. Rev.* **2007**, *36*, 1095.

<sup>2</sup> a) Jung, J.-C.; Park, O.-S. *Molecules* **2009**, *14*, 4790. b) Hamdi, N.; Saoud, M.; Romerosa, A. *Top. Heterocycl. Chem.* **2007**, *11*, 283. c) Gudasi, K. B.; Vadavi, R. S.; Patil, M. S. *Eur. J. Med. Chem.* **2004**, *45*, 5139.

<sup>3</sup> a) Pagona, G.; Katerinopoulos, H. E.; Tagmatarchis, N. *Chem. Phys. Lett.* **2011**, *516*, 76. b) Jacquemin, D.; Perpète, E. A.; Ciofini, I.; Adamo, C. *Acc. Chem. Res.* **2009**, *42*, 326.