Estudos sobre o uso de ácido de Lewis em reações de Friedel-Crafts

Jader da Silva Barbosa (PG), Daiane Cristina Sass (PG), Mauricio Gomes Constantino (PQ).

Departamento de Química, FFCLRP-USP

* Tel: +55 (016)-36023879 silvajdr@pg.ffclrp.usp.br Palavras Chave: Friedel-Crafts, indanonas e Nióbio.

Introdução

A reação de Friedel-Crafts é um dos métodos mais simples e eficientes para a síntese de cetonas benzocíclicas como as 1-indanonas (figura 1). Estes esqueletos indânicos são de grande interesse, pois estão presentes em uma série de produtos naturais e fármacos com atividade biológica, como o Indinavir® - um inibidor da HIV - protease, o Aricept® - utilizado no tratamento do mal de Alzheimer¹ e o Mutisiantol.

(±)-Mutisiantol Figura 1. Exemplos de sistemas indânicos.

Aricent®

MeC

Recentemente nosso grupo de pesquisa iniciou um estudo para a obtenção deste tipo de estrutura a partir de reações de acilação de Friedel-Crafts intramolecular com ácidos do tipo 1 (esquema 1), utilizando NbCl₅.2

Esquema 1. Formação de Indanona por acilação de Friedel-Crafts.

Dando continuidade a estes estudos, neste trabalho foram realizadas reações do tipo Friedel-Crafts inter e intramoleculares, utilizando sistemas aromáticos e alguns ácidos conjugados, como mostrado no esquema 2.

$$R \stackrel{\text{fi}}{=} + R \stackrel{\text{CO}_2H}{\longrightarrow} R \stackrel{\text{NbCl}_5}{=} R$$

Esquema 2: Reação de Friedel-Crafts intra e intermolecular.

Resultados e Discussão

Primeiramente realizamos estes estudos com o composto o-xileno 2 e o ácido carboxílico 4 que foi submetido a reações na presença de 1 equivalente

de NbCl₅, sob atmosfera de N₂, nas temperaturas de 0°C, 25°C e refluxo (tabela 1).

Tabela 1. Reação do o-xileno (2) com o ácido 4

	4	,	8
	Indanona 7	Indanona 8	Tempo
Refluxo	31%	33%	50 min.
25℃	26%	33%	80 min.
20	22%	32%	120 min.

Nas reações do xileno 2 com o ácido 4 houve a formação dos produtos provenientes da reação de Friedel-Crafts intermolecular seguida de outra intramolecular, formando assim os produtos do tipo indanona 7 e 8.

Tabela 2. Reação do p-xileno (9) com o ácido 4.

	Indanona 10	Composto 11	Tempo
Refluxo	28%	27%	180 min.
25℃	37%	15%	180 min.
0℃	35%	20%	180 min.

Testes foram feitos usando o xileno 9 com o ácido 4 em refluxo, 25°C e 0°C. Obtivemos a formação da indanona 10 e uma parte do composto 11 não ciclizado.

Conclusões

As reações dos aromáticos com o ácido 4 na presença de NbCl₅ forneceram, como esperado, em apenas uma etapa, compostos com esqueletos indânicos, comprovando a eficácia do NbCl₅ como ácido de Lewis em reações de Friedel-Crafts. Estudos estão sendo feitos para melhorar os rendimentos.

Agradecimentos

FAPESP, CAPES, CNPQ e FINEP

1) Sugimoto, H. Pure Appl. Chem. **1999**, 71, 2031.

²) Pollo, E. C.; Silva Filho, L. C.; Da Silva, G. V.; Constantino, M. G. Ouim. Nova 2008, 31, 763-766.

33ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química