

Síntese verde de ésteres derivados do alcatrão vegetal com potencial atividade anti-inflamatória

Ruth P. Paulino^{1*} (IC), Adriana A. Okuma¹ (PQ), Lucenir P. Duarte² (PQ)

¹ Depto de Química / CEFET-MG, Campus I, Av. Amazonas, 5253- Nova Suíça- Belo Horizonte/MG, CEP 30.421-169

² Depto de Química / ICEX / UFMG, Av. Antônio Carlos, 6627- Pampulha - Belo Horizonte/MG, CEP 31.270-901

*e-mail: ruth_paris_90@hotmail.com

Palavras Chave: química verde, biomassa renovável, micro-ondas, ésteres, agente anti-inflamatório.

Introdução

A busca por novas metodologias de pesquisa que não causam impactos ambientais tem sido um dos desafios da Química Verde. Em um trabalho recente, foram realizados estudos farmacológicos sobre ésteres derivados do ácido 3,4,5-trimetoxibenzóico (ácido TMB), comprovando sua eficácia como agentes anti-inflamatórios além de não promover a formação de radicais livres no organismo.¹ Neste contexto, o presente trabalho teve como objetivo a síntese de novas substâncias bioativas, a partir de biomassa renovável, promovida por irradiação de micro-ondas², de acordo com os princípios da Química Verde.

Resultados e Discussão

As reações de esterificação foram processadas em um forno de micro-ondas doméstico adaptado para reações químicas, sob pressão atmosférica, sem solvente. Na metodologia empregada, utilizou-se como materiais de partida o ácido TMB, guaiacol **1** e vanilina **2** – derivados do alcatrão vegetal. As reações foram catalisadas por N,N'-diisopropilcarbodiimida (DIC) e 4-dimetilaminopiridina (DMAP), levando à obtenção dos ésteres 3,4,5-trimetoxibenzoato de 2-metoxifenila **3** e 3,4,5-trimetoxibenzoato de 4-formil-2-metoxifenila **4** (Figura 1).

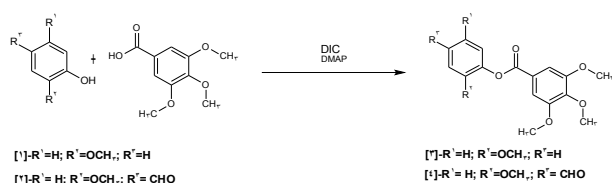


Figura 1. Reação de esterificação.

O método proposto possibilitou a obtenção dos ésteres de interesse com boa conversão por Cromatografia a Gás acoplada à Espectrometria de Massas (CG-EM), em um curto tempo de reação, utilizando materiais de partida de baixo custo, sem solvente. O monitoramento das reações e a caracterização dos produtos obtidos foram realizados por CGAR-EM. Os espectros de massas dos produtos apresentaram o pico do íon molecular

e o pico base atribuído ao íon acílio, permitindo a identificação dos ésteres formados (Tabela 1).

Tabela 1. Condições experimentais e resultados das reações de esterificação

| Condições e resultados | Materiais de Partida | |
|--------------------------------------|----------------------|---------------------|
| | Ácido TMB, Guaiacol | Ácido TMB, Vanilina |
| Condições experimentais | Micro-ondas, 24 min | Micro-ondas, 26 min |
| Conversão por CG-EM | 97% | 78% |
| Principais picos no EM | | |
| Íon acílio (ArCO ⁺), m/z | 195,318 | 195,346 |
| Íon molecular (M ⁺), m/z | | |

A reação de esterificação apresentada baseia-se no conceito de economia atômica, pois se trata de uma reação direta, com a redução de etapas e eliminação de reagentes e intermediários de síntese. É importante ressaltar que a síntese clássica envolve uma etapa de conversão do ácido carboxílico em cloreto de acila, promovida pelo cloreto de tionila, um reagente altamente tóxico e de elevado custo.

Conclusões

A metodologia apresentada neste trabalho possibilitou a obtenção dos ésteres de interesse, sob condições viáveis, utilizando a irradiação de micro-ondas como fonte alternativa de energia e reagentes provenientes de biomassa renovável, de acordo com os princípios da Química Verde.

Agradecimentos

FAPEMIG, DPPG/CEFET-MG, Biocarbo.

¹ Dhingra, M. S.; Deb, P. K.; Chadha, R.; Singh, T.e Karam, M. *Medicinal Chemistry Research*. Janeiro 2014, 23, 87-106.

² Graebin, C.F., Eifler-Lima, V.L. *Química Nova*. 2005, 28, 73-76.