

## Síntese verde de 2-aryl-2-oxazolininas derivadas de alcatrão vegetal

Orsilane S. de Carvalho<sup>1\*</sup> (IC), Adriana A. Okuma (PQ)<sup>1</sup>, Lucienir P. Duarte (PQ)<sup>2</sup>

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

<sup>1</sup> Depto de Química / ICEx-UFMG, Av. Antônio Carlos, 6627- Pampulha - Belo Horizonte/MG, CEP 31.270-901

\*e-mail: silaninhacarvalho@gmail.com

Palavras Chave: química verde, alcatrão vegetal, 2-aryl-2-oxazolininas.

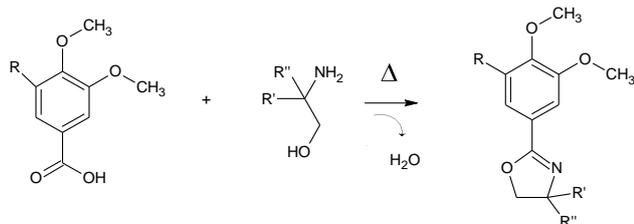
### Introdução

A queima da madeira de *Eucalyptus sp.* para a produção de carvão vegetal, libera fumaças como subprodutos. A condensação dessas fumaças permite a redução do impacto ambiental e a recuperação do alcatrão vegetal – uma fonte renovável de insumo químico.<sup>1</sup> A destilação fracionada e a derivatização química do alcatrão vegetal fornece os ácidos 3,4-dimetoxibenzóico (ác. DMB **1**) e 3,4,5-trimetoxibenzóico (ác. TMB **2**), importantes materiais de partida em sínteses orgânicas como, por exemplo, na síntese de 2-aryl-2-oxazolininas. 2-oxazolininas são heterociclos versáteis, que apresentam diversas aplicações, tais como ligantes, auxiliares ou catalisadores em sínteses orgânicas e como aditivos em combustíveis. Assim, o presente trabalho apresenta a obtenção de 2-aryl-2-oxazolininas a partir de ácidos carboxílicos derivados do alcatrão vegetal e aminoalcoóis de baixo custo, por meio de metodologias que seguem os princípios da Química Verde, em substituição à síntese orgânica clássica.<sup>2</sup>

### Resultados e Discussão

(*R*)-(-)-2-(3,4-dimetoxifenil)-4-fenil-2-oxazolinina **5**, 2-(3,4-dimetoxifenil)-4,4-dimetil-2-oxazolinina **6** e 2-(3,4,5-trimetoxifenil)-4,4-dimetil-2-oxazolinina **7** foram obtidas a partir da reação direta entre os ácidos carboxílicos **1** e **2** e os aminoalcoóis 2-amino-2-metil-propan-1-ol **3** e (*R*)-(-)-2-amino-3-fenil-etan-1-ol **4**, sob aquecimento em autoclave, sem solvente (Esquema 1).

**Esquema 1:** Equação geral para a reação de obtenção de 2-aryl-2-oxazolininas



(1) R = H                      (3) R' = R'' = CH<sub>3</sub>                      (5) R = H; R' = φ; R'' = H

(2) R = OCH<sub>3</sub>                      (4) R' = φ; R'' = H                      (6) R = H; R' = R'' = CH<sub>3</sub>

(7) R = OCH<sub>3</sub>; R' = R'' = CH<sub>3</sub>

**Tabela 1.** Condições de reação e resultados obtidos na síntese de 2-aryl-2-oxazolininas

Materiais de partida	Condições experimentais	Produto obtido	Conversão por CG-EM
<b>1 + 4</b>	200 °C, 40 min	<b>5</b>	76%
<b>1 + 3</b>	190 °C, 40 min	<b>6</b>	100%
<b>2 + 3</b>	185 °C, 35 min	<b>7</b>	83%

O método proposto apresenta como vantagens a não utilização de solventes e reagentes tóxicos e de elevado custo como o cloreto de tionila, em curto tempo de reação, levando à obtenção das 2-aryl-2-oxazolininas de interesse, com boa conversão por CG-EM. O monitoramento das reações e a caracterização dos produtos foram realizados por CG-EM. Os espectros de massas dos produtos obtidos registrou, como principais sinais, o pico do íon molecular (M<sup>+</sup>) e o pico atribuído ao cátion acílio (Ar-C≡O<sup>+</sup>), característico de compostos carbonílicos.

### Conclusões

A metodologia proposta possibilitou a obtenção de três oxazolininas (**5**, **6** e **7**), a partir de substâncias derivadas de biomassa renovável, utilizando condições experimentais que atendem aos princípios da Química Verde.

### Agradecimentos

DPPG/CEFET-MG, CNPq, Biocarbo.

<sup>1</sup> Menegale V.L.C, Leão A.L, Filho G.H, Menegale M. L. C Resíduos Agroindustriais para enriquecimento de fertilizantes orgânicos, *Energia da Agricultura*, Botucatu, v.27, n° 2, 114-115, 2012.

<sup>2</sup> Okuma, A. A., Antônio, D.C., Carazza, F., Duarte L.P, Microwave assisted green synthesis of aryl methoxylated benzamides and 2-oxazolinines from biomass, *Green Processing and Synthesis*, v.2, 51-56, 2013.