

## Betaínas e oxazolidinas derivadas de sais de 2,4,6-trifenilpiridínio

Juliana M. Nakagawa (PG)\*, Bruno C. Guerrieri (IC), Claudio Di Vitta (PQ), Liliana Marzorati (PQ)

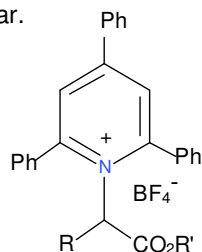
Instituto de Química da Universidade de São Paulo najumino@gmail.com

Sais de piridínio, betaínas, ilidas, aldeídos aromáticos, β-aminoálcoois

### Introdução

β-aminoálcoois são intermediários de grande interesse na síntese de fármacos. Sua utilidade em síntese assimétrica está diretamente ligada à sua propriedade de funcionar como ligantes ou auxiliares quirais<sup>1</sup>.

Em nosso laboratório, durante estudos visando a síntese do fármaco Baclofen® e seus análogos, tornou-se necessário buscar um método geral para a preparação de α-aril-β-aminoálcoois, com variado padrão de substituição no anel aromático. Para a obtenção de tais compostos, propusemos uma rota sintética baseada na reação de betaínas derivadas de tetrafluoroboratos de 2,4,6-trifenilpiridínios, contendo uma função éster em posição α ao nitrogênio anelar.

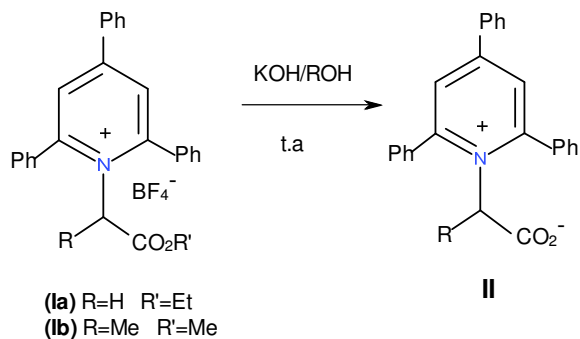
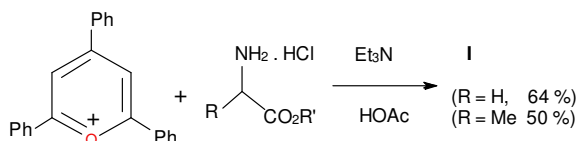


(Ia) R=H R'=Et  
(Ib) R=Me R'=Me

Nessa proposta, sais do tipo I, derivados da glicina ou da alanina, seriam transformados em suas respectivas betaínas II que, ao serem descarboxiladas, na presença de aldeídos aromáticos, conduziram a oxazolidinas III. A liberação dos β-aminoálcoois de interesse seria realizada por metodologia já desenvolvida em nosso laboratório<sup>2</sup>.

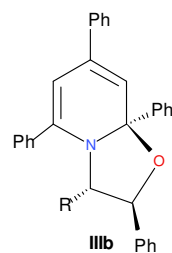
### Resultados e Discussão

Inicialmente, foi efetuada a preparação dos sais de piridínio I, pela reação dos cloridatos de ésteres da glicina ou da alanina com o tetrafluoroborato de 2,4,6-trifenilpiridílio, na presença de trietilamina e de ácido acético glacial.



A saponificação dos tetrafluoroboratos de 2,4,6-piridínio I, com KOH alcoólico, conduziu às respectivas betaínas, na forma de sólidos amorfos de cor laranja, cujo espectro de RMN de H permitiu sua caracterização inequívoca.

A reação da betaína IIb com benzaldeído, via a ilida correspondente, resultou em uma mistura de 4 estereoisômeros, um deles em muito pequena proporção, dois deles em proporção equivalente e outro preponderante. A análise de modelos moleculares parece indicar que a estereoquímica relativa da oxazolidina formada em maior quantidade seja:



Na reação com benzaldeído, a betaína Ia é menos reativa do que a betaína IIb.

### Conclusões

A obtenção de oxazolidinas a partir de sais de piridínio e aldeídos é viável, podendo no futuro ser realizada em sua versão assimétrica, na presença de catalisadores de transferência de fase quirais.

### Agradecimentos

CNPq, FAPESP, CAPES, RUSP

<sup>1</sup> Ager, D.J., Prakash I. e Schaad D.R. *Chem.Rev.* **1996**, 96, 835.

<sup>2</sup> Marzorati, L., Di Vitta P.B., Wladislaw B., Schpector, J.Z., Di Vitta, C. *Heterocycles*, **2009**, 78, 1223.