

# Resolução cinética dinâmica de amins benzílicas substituídas utilizando catalisador de Pd suportado em MgCO<sub>3</sub>

**Camila Rodrigues Cabreira (IC), Pedro H. K. Chaves (IC) e Fernanda Amaral de Siqueira (PQ)\***

Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas – Universidade Federal de São Paulo – Campus Diadema – Rua Prof. Arthur Riedel, 275 – CEP 09972-270 - Diadema – SP – [famsiq@gmail.com](mailto:famsiq@gmail.com)

Palavras Chave: Resolução Cinética Dinâmica, amins benzílicas, CALB, paládio.

## Abstract

Dynamic kinetic resolution of substituted benzylic amines using palladium catalyst supported in MgCO<sub>3</sub>.

In this work were described the DKR of 3 benzylic amines. We obtained moderated yields and excellent ee's.

## Introdução

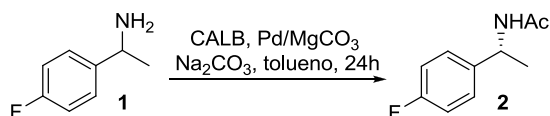
Amins e acetamidas assimétricas são blocos de construção de importância na indústria química, pois são frequentemente utilizadas na síntese de compostos biologicamente ativos. Uma metodologia eficaz para sintetizar amins quirais é a Resolução Cinética Dinâmica, uma metodologia que combina a Resolução Cinética Enzimática com um processo de racemização *in situ*, levando ao produto quiral em um rendimento teórico de 100%.<sup>1</sup>

Neste trabalho apresentamos as reações de Resolução Cinética Dinâmica com o uso de CALB e Pd/MgCO<sub>3</sub> de 3 amins benzílicas, uma substituída com flúor no anel aromático e duas cíclicas.

## Resultados e Discussão

Baseados em resultados anteriores de nosso grupo de pesquisa com a 1-feniletilamina, decidimos utilizar **1** para avaliar sua reatividade.<sup>2</sup> Variou-se o agente acilante e a temperatura. Os melhores resultados encontram-se na Tabela 1.

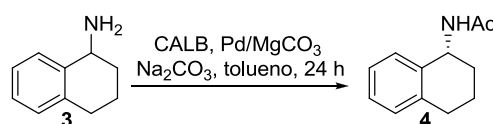
**Tabela 1.** Resolução cinética dinâmica de **1**.



| Entrada | Acilante        | T (°C) | Rend (%) | ee (%) |
|---------|-----------------|--------|----------|--------|
| 1       | Ac. de etila    | 60     | 30       | >99    |
| 2       | Ac. de isoamila | 60     | 48       | >99    |
| 3       | Ac. de etila    | 80     | 26       | 98     |
| 4       | Ac. de isoamila | 80     | 45       | 98     |
| 5       | Ac. de etila    | 100    | 42       | 89     |
| 6       | Ac. de isoamila | 100    | 50       | 98     |

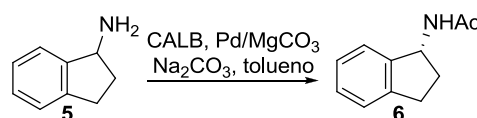
A partir das reações com os compostos **3** e **5**, avaliamos a reatividade de amins em sistemas cíclicos de 6 e 5 átomos, variando também temperatura e agente acilante (Tabelas 2 e 3).

**Tabela 2.** Resolução cinética dinâmica de **3**.



| Entrada | Agente acilante | T (°C) | Rend (%) | ee (%) |
|---------|-----------------|--------|----------|--------|
| 1       | Ac. de etila    | 60     | 23       | 90     |
| 2       | Ac. de isoamila | 60     | 19       | 96     |
| 3       | Ac. de etila    | 80     | 35       | 96     |
| 4       | Ac. de isoamila | 80     | 40       | 98     |
| 5       | Ac. de etila    | 100    | 47       | 95     |
| 6       | Ac. de isoamila | 100    | 48       | 98     |

**Tabela 3.** Resolução cinética dinâmica de **5**.



| Entrada | Agente acilante   | T (°C) | Rend (%) | ee (%) |
|---------|-------------------|--------|----------|--------|
| 1       | Ac. de etila      | 60     | 38       | 99     |
| 2       | Ac. de etila      | 70     | 54       | 62     |
| 3       | Ac. de isopropila | 60     | 50       | 97     |

## Conclusões

Foi possível obter acetamidas assimétricas em rendimentos moderados, mas em excelentes excessos enantioméricos nas condições otimizadas. A presença do flúor em **1** e a rigidez de sistemas cíclicos em **3** e **5** podem ter diminuído a reatividade desses compostos, comparado à 1-feniletilamina. Essas reações continuam em estudo em nosso grupo de pesquisa.

## Agradecimentos

FAPESP, UNIFESP – Campus Diadema

<sup>1</sup> Gustafson, K. P. J.; Lihammar, R.; Verho, O.; Engström, K.; Bäckvall, J.-E. J. Org. Chem. **2014**, 3747.

<sup>2</sup> Ferreira, M. M. M.; de Lima, S. M.; Siqueira, F.A. 38RASBQ, org 106.