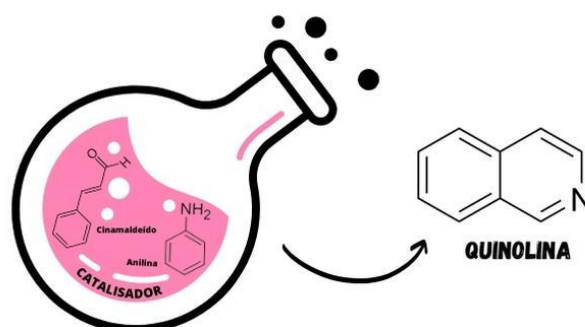


Estratégias Sustentáveis para Obtenção de Quinolinas

Adriana da Veiga Torres¹, Juliana Baptista Simões^{1*}

REAÇÃO DE POVAROV



A habilidade de gerar novas moléculas de forma eficiente é essencial para diversas áreas como, química medicinal, bioquímica, entre outras. As sínteses orgânicas precisam atender a alguns requisitos: seletividade, complexidade e eficiência, sendo fundamental que estejam de acordo com os princípios da Química Verde. Sendo assim, a utilização de reagentes procedentes de matérias-primas renováveis tem se tornado um destaque no processo de síntese. O objetivo deste trabalho é utilizar o cinamaldeído, natural do óleo essencial da canela em casca, como material de partida para síntese de quinolinas por meio da reação multicomponente de Povarov, utilizando diversos catalisadores cujo intuito é determinar o mais favorável para a reação. A reação multicomponente de Povarov é uma reação de ciclocondensação, que ocorre a transferência de todos os átomos dos reagentes aos produtos, sendo classificada como uma reação de alta economia atômica. A reação utilizada neste projeto ocorreu entre uma amina (anilina), aldeído e um alceno (cinamaldeído), utilizando a acetonitrila como solvente e um catalisador ácido. Foram realizadas 11 reações utilizando 6 catalisadores diferentes ($\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$; $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6$; FeCl_3 ; SnCl_2 ; $\text{C}_2\text{HF}_3\text{O}_2$ e HgO) variando nas proporções dos materiais de partida cinamaldeído:anilina em 1:1 e 2:1. O tempo de reação estudado até o momento foi de 3 horas à 4,5 horas. Utilizou-se a cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas para estimar os compostos presentes em cada reação. Apenas nas reações utilizando ácido ascórbico ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6$) e óxido de mercúrio II (HgO) apresentaram sinais nos espectros cujo tempo de retenção variou-se entre 12,5 minutos, possível intermediário da reação, e entre 14,5-16,3 minutos, possíveis dihidroquinolinas. Assim, conclui-se que houve resultados promissores nos testes utilizando catalisadores distintos, em algumas reações não foi possível quantificar e determinar sua composição, assim serão repetidas as análises cromatográficas das mesmas. O próximo passo da pesquisa requer o isolamento da molécula de interesse para realizar uma espectroscopia de ressonância magnética de hidrogênio e carbono para caracterização dos compostos.

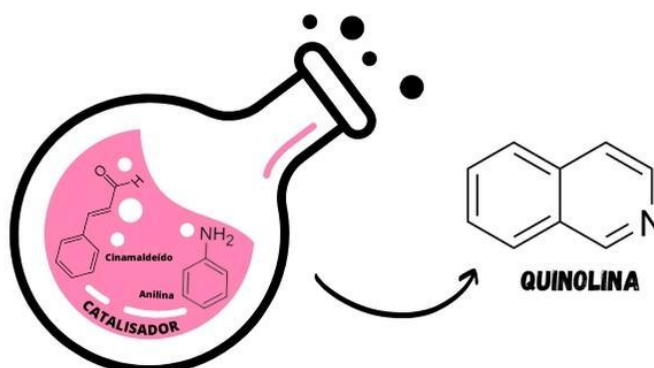
Instituição do Programa de IC, IT ou PG: CNPq

Fomento da bolsa (quando aplicável): Instituto Federal Fluminense - Campus Itaperuna

Sustainable Strategies for Obtaining Quinolines

Adriana da Veiga Torres¹, Juliana Baptista Simões^{1*}

REAÇÃO DE POVAROV



The ability to generate new molecules efficiently is essential for several areas such as medicinal chemistry, biochemistry, among others. Organic syntheses need to meet some requirements: selectivity, complexity and efficiency, being essential that they are in accordance with the principles of Green Chemistry. Therefore, the use of reagents from renewable raw materials has become a highlight in the synthesis process. The objective of this work is to use cinnamaldehyde, natural from the essential oil of cinnamon bark, as a starting material for the synthesis of quinolines through the multicomponent Povarov reaction, using several catalysts whose purpose is to determine the most favorable for the reaction. The Povarov multicomponent reaction is a cyclocondensation reaction, which transfers all atoms from the reactants to the products, being classified as a reaction of high atomic economy. The reaction used in this project took place between an amine (aniline), aldehyde and an alkene (cinnamaldehyde), using acetonitrile as a solvent and an acid catalyst. Eleven reactions were carried out using 6 different catalysts ($\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$; $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6$; FeCl_3 ; SnCl_2 ; $\text{C}_2\text{HF}_3\text{O}_2$ and HgO) varying the proportions of the starting materials cinnamaldehyde:aniline in 1:1 and 2:1. The reaction time studied so far was from 3 hours to 4.5 hours. Gas chromatography coupled to mass spectrometry was used to estimate the compounds present in each reaction. Only in the reactions using ascorbic acid ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6$) and mercuric oxide II (HgO) showed signs in the spectra whose retention time varied between 12.5 minutes, a possible intermediate of the reaction, and between 14.5 -16.3 minutes, possible dihydroquinolines. Thus, it is concluded that there were promising results in the tests using different catalysts, in some reactions it was not possible to quantify and determine their composition, so the chromatographic analysis of the same will be repeated. The next step of the research requires the isolation of the molecule of interest to perform a hydrogen and carbon magnetic resonance spectroscopy to characterize the compounds.

Instituição do Programa de IC, IT ou PG: CNPq

Fomento da bolsa (quando aplicável): Instituto Federal Fluminense - Campus Itaperuna