

PESQUISA/INICIAÇÃO CIENTÍFICA - PESQUISA/ INICIAÇÃO CIENTÍFICA

OTIMIZAÇÃO DA REAÇÃO PARA OBTENÇÃO DE UM COMPOSTO 1,5-DICARBONÍLICO E SUA UTILIZAÇÃO COMO INTERMEDIÁRIO NA PREPARAÇÃO DA 4-(2-(1H-PIRAZOL-1-IL)FENIL)-2,6-DIFENILPIRIDINA

Christian Emanuel Cristaldo Vilhalba (vilhalba.christian@gmail.com)

Piridinas polissubstituídas e derivados pirazólicos são compostos de grande interesse para a comunidade sintética, seja por suas aplicações em química medicinal, interessantes propriedades fotofísicas ou aplicações como ligantes em química de coordenação. Neste contexto, o atual projeto tem como objetivo a síntese e a caracterização de um híbrido piridina-pirazol derivada do composto 1,5-dicarbonílico, para obtenção do mesmo em escala adequada, seguido da otimização das condições para reação de formação da piridina correspondente. Considerando que o 2-pirazolil-benzaldeído não é comercialmente disponível, e que sua obtenção se dá apenas com rendimento moderado a partir de reagentes comerciais, optamos por utilizar os substratos mais simples benzaldeído e acetofenona como modelo. Desta forma, inicialmente testamos três diferentes protocolos para obtenção do intermediário chave 1,5-dicetona, sendo eles: preparação da chalcona via reação entre benzaldeído e acetofenona, isolamento, e adição de Michael da acetofenona à chalcona obtida – ambas catalisadas por base; preparação da chalcona e reação de Michael one-pot, em condições semelhantes às anteriores e reação mecanoquímica em passo único. Para estas reações foram obtidos os rendimentos de 31%, 48% e 41%, respectivamente. Para a formação da piridina, o intermediário 1,5-dicetona foi submetido à reação de

ciclocondensação; utilizando 10 equivalentes de acetato de amônio como fonte de nitrogênio sob refluxo em etanol, obteve-se o produto com 39% de rendimento. Aumentando-se a quantidade de acetato de amônio para 20 equivalentes, foi possível alcançar um rendimento superior de 83%. As condições reacionais que levaram aos melhores resultados para o modelo foram então utilizadas para a preparação do derivado do 2-pirazol-benzaldeído. A 1,5-dicetona correspondente foi obtida através do procedimento one-pot com rendimento de 86% e 65% após purificação por cromatografia em coluna. A reação de ciclocondensação foi realizada, obtendo-se como produto o híbrido pirazol-piridina, com o rendimento de 51%. Os intermediários 1,5-dicetona e a piridina foram analisados por ressonância magnética nuclear de hidrogênio e carbono-13, corroborando as estruturas propostas. Como conclusão, temos que os procedimentos adotados permitiram obter a piridina com um rendimento moderado e o intermediário 1,5-dicetona derivado do 2-pirazol-benzaldeído em bom rendimento, ambos os produtos foram obtidos com bom grau de pureza de acordo com análises realizadas.

AGRADECIMENTOS: CNPq, Capes e UFGD pelo suporte estrutural concedido para a realização desta pesquisa e ao CNPq pelo apoio financeiro.

Palavras-chave: pirazol; 1,5-dicarbonílicos; piridina.