

REAÇÕES MULTICOMPONENTES DE BIGINELLI E DE MANNICH NAS AULAS DE QUÍMICA ORGÂNICA EXPERIMENTAL. UMA ABORDAGEM DIDÁTICA DE CONCEITOS DA QUÍMICA VERDE

Marcelo Volpato Marques, Tula Beck Bisol e Marcus Mandolesi Sá*

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, 88040-900 Florianópolis - SC, Brasil

CONSIDERAÇÕES GERAIS

Os solventes e reagentes empregados nas sínteses e caracterizações foram adquiridos de fontes comerciais (Aldrich, Acros, Fluka, Nuclear, Synth) e utilizados sem prévia purificação. Os pontos de fusão das substâncias sólidas foram determinados em um aparelho Microquímica MQAPF-301 e não foram corrigidos. Os espectros no infravermelho foram registrados em um espectrofotômetro Perkin-Elmer Spectrum 100 FT-IR, com as frequências de absorção sendo expressas em cm^{-1} . As amostras, todas sólidas, foram analisadas em pastilhas de KBr.

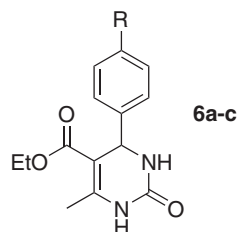


Tabela 1S. Exemplos selecionados da reação de Biginelli para a preparação de 3,4-di-hidropirimidin-2-onas **6a-c**

#	R	Aditivo (mol %)	Solvente	T (°C)	Tempo (h)	Rend. (%) ^a
6a	H	LiBr (10)	CH ₃ CN	Refluxo	3	15
6a	H	NH ₄ Cl (40)	-	100	3	45-75 ^b
6b	Cl	LiBr (10)	CH ₃ CN	Refluxo	4	20-30 ^b
6b	Cl	CuCl ₂ ·2H ₂ O (20)	-	100	2	40-50 ^b
6b	Cl	ClCH ₂ COOH (10)	-	90	2,5	35
6c	CH ₃ O	NH ₄ Cl (40)	-	100	3	45
6c	CH ₃ O	H ₃ BO ₃ (20)	CH ₃ COOH	100	3	75

^a Rendimento do produto sólido obtido após recristalização. ^b Faixa de rendimento observado para três experimentos distintos.

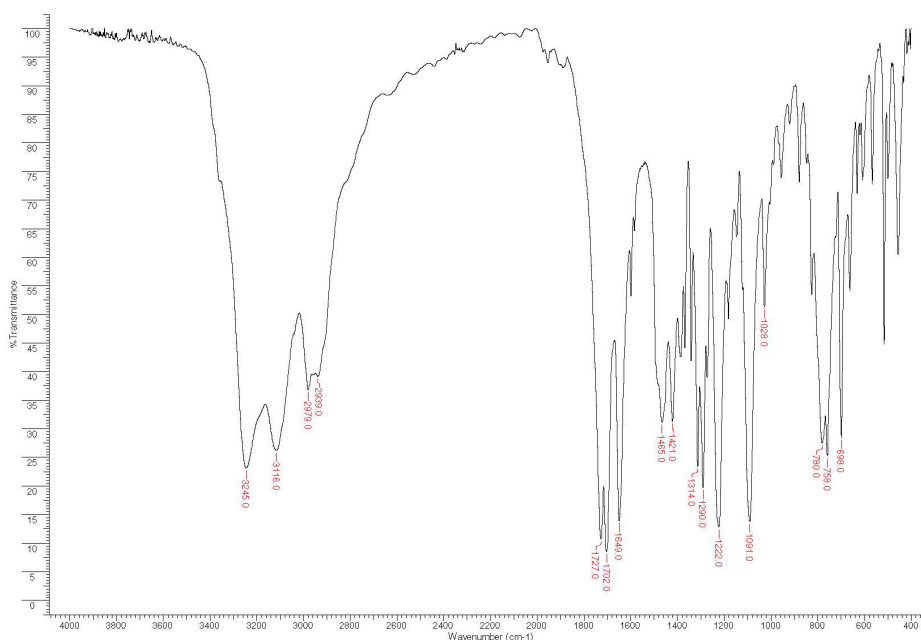


Figura 1S. IV (KBr, cm^{-1}) da di-hidropirimidinona **6a**

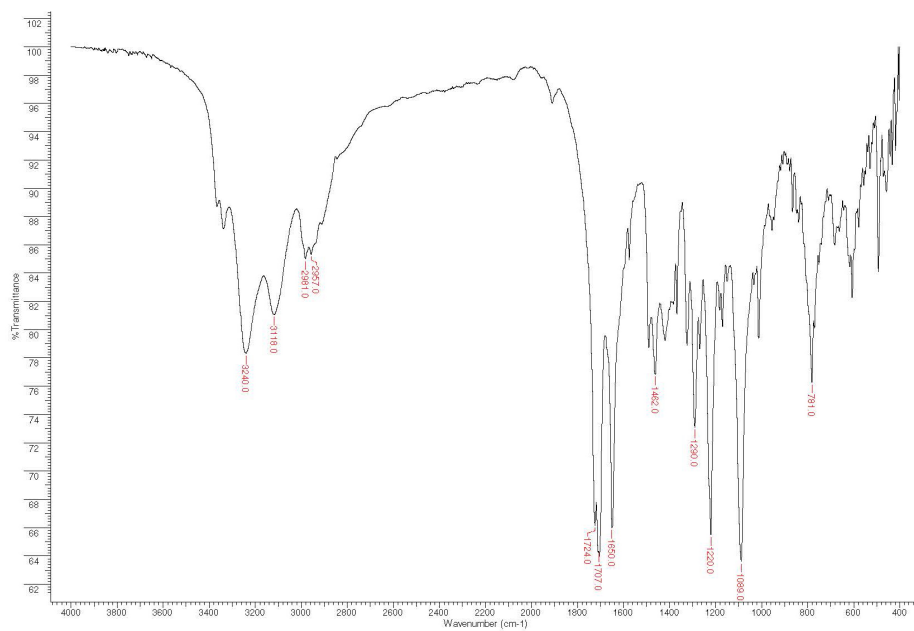


Figura 2S. IV (KBr, cm⁻¹) da di-hidropirimidinona 6b

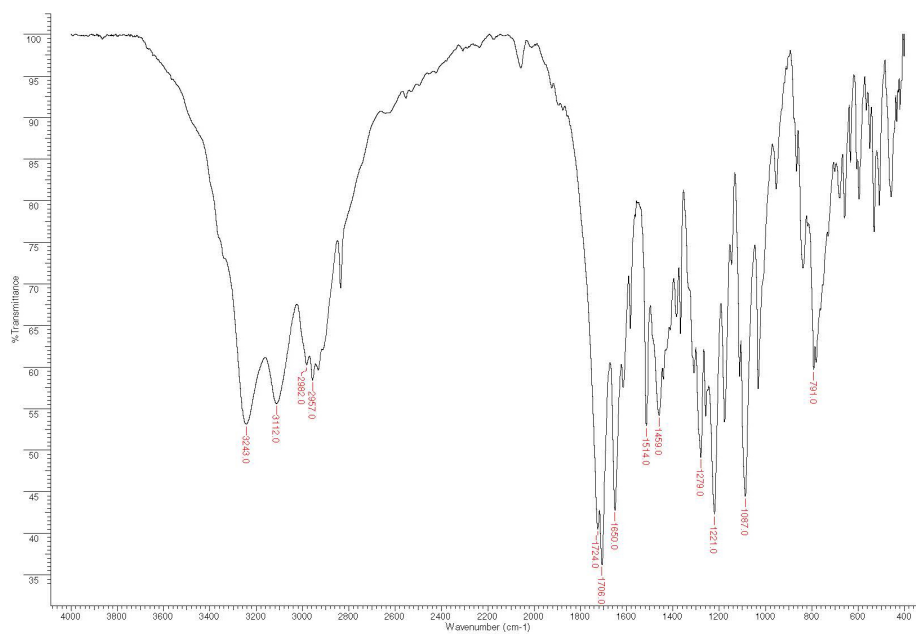


Figura 3S. IV (KBr, cm⁻¹) da di-hidropirimidinona 6c

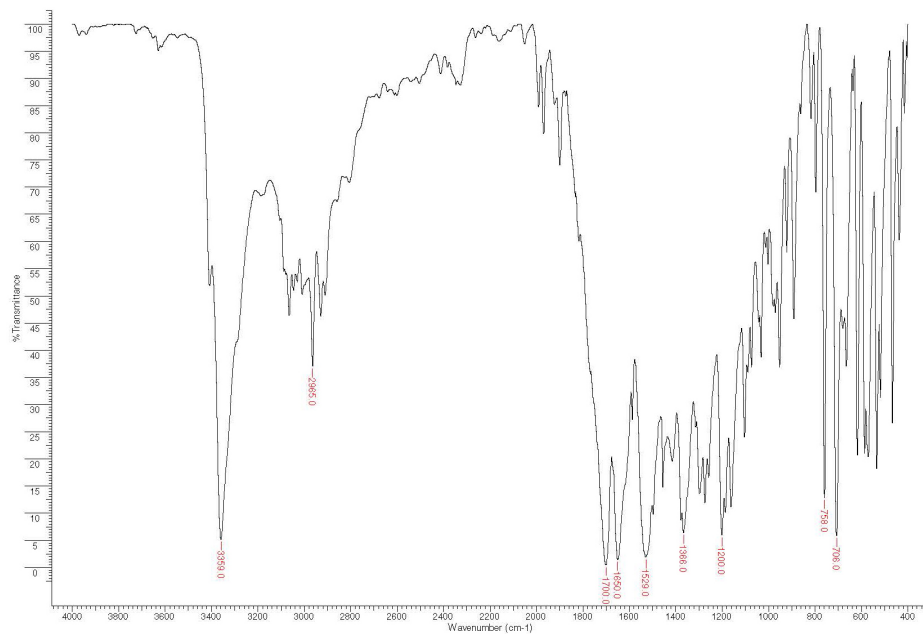


Figura 4S. IV (KBr, cm⁻¹) da β -acetamido dicetona **7a**

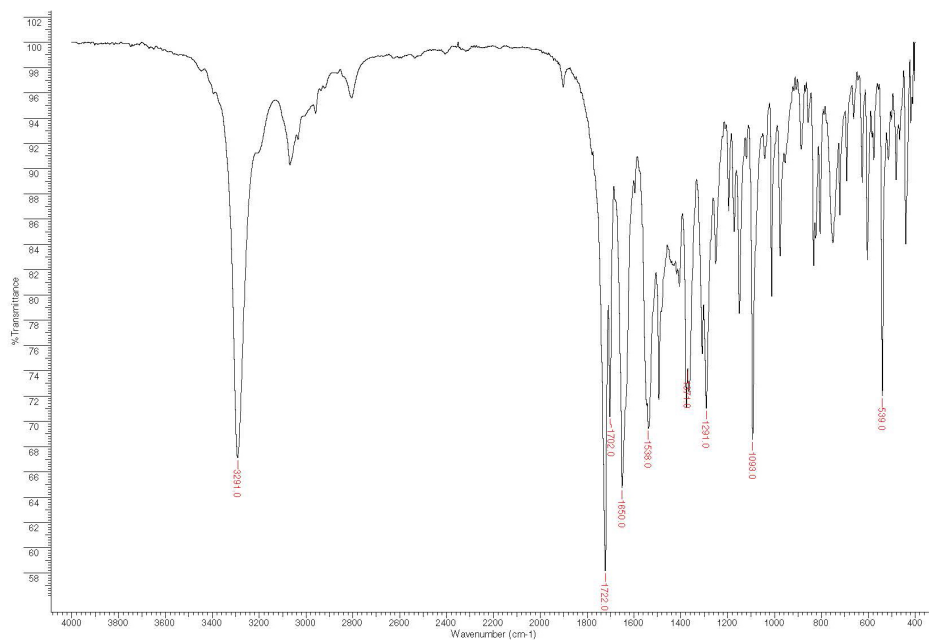


Figura 5S. IV (KBr, cm⁻¹) da β -acetamido dicetona **7b**

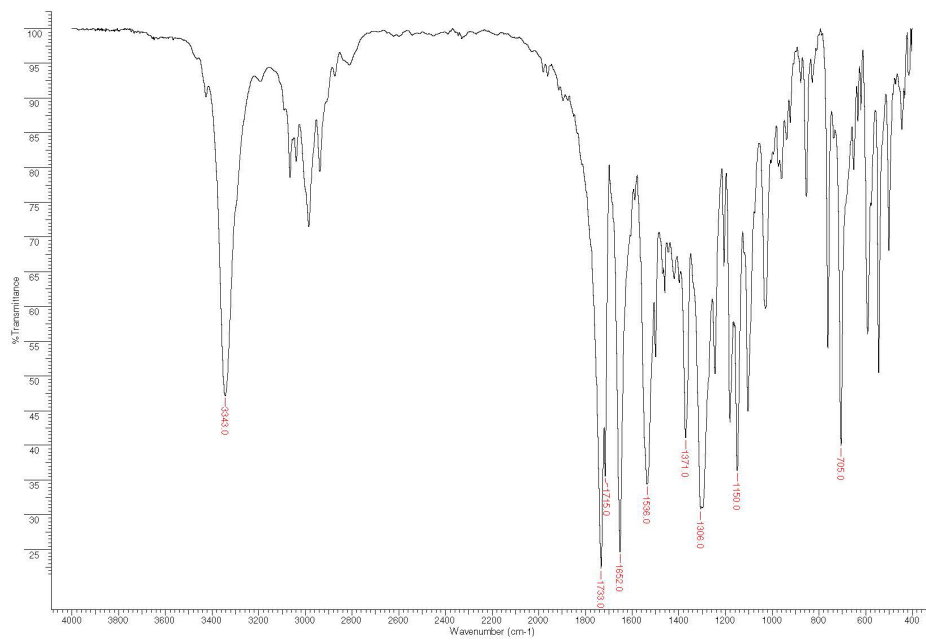


Figura 6S. IV (KBr; cm^{-1}) do β -acetamido cetoéster **8a**