

Área: Ciências Exatas e da Terra 1.06.02.00-3

Projeto: COMPLEXOS DE VO₂⁺ COM DERIVADOS DA ACETILACETONA E ALDEÍDOS NATURAIS

Autores: DIEGO DA MOTA LAWANDOVSKI (XXII PIBIC/XXVI BIC/UFJF); PÂMELA CRISTINA DE SOUZA RESENDE (XXII PIBIC/XXVI BIC/UFJF); ALEXANDRE CUIN (ORIENTADOR);

Resumo:

A reação de Knoevenagel é um tipo de condensação em que aldeídos ou cetonas são transformados em derivados de etileno ^[1]. A Condensação de Knoevenagel é um método conveniente para a síntese de compostos α,β -insaturados e que é útil para várias transformações sintéticas, especialmente na síntese de produtos bioativos e sintético. Aqui, relatamos a estrutura cristalina do 3-[(2E)-3-fenilprop-2-en-1-ilideno]-pentano-2,4-diona, ou simplesmente nomeado como sendo CinnAcac. No caso do CinnAcac, duas moléculas independentes são encontradas na célula unitária. Os dois grupos carbonilo presentes em cada molécula são torcidos por 52,6° numa única molécula e 55,86° na outra. Os átomos de oxigênio O22 e O11 também têm distorção entre 130 e 121°, respectivamente. As moléculas adjacentes são ligadas por interações de hidrogênio entre o átomo de oxigênio dos grupos carbonílicos com os átomos de hidrogênio dos grupos insaturados -metileno e cloreto de metileno em uma cadeia ao longo do eixo b. O composto foi obtido reagindo-se 10,3 mL (0,1 mol) de acetilacetona em 13,3 mL de cinamaldeído (0,1 mol). A mistura ficou sob agitação e banho de gelo. Após 2h, apenas uma gota de pirrolidina foi adicionada à solução. A solução final ficou sob agitação à temperatura ambiente (20-25 °C) durante 10 minutos. A solução amarela foi mantida sob refrigeração durante 2 dias. A solução foi lavada três vezes com uma mistura de 10 mL de solução aquosa de HCl (1,0 mol.L⁻¹) e 10 mL de CH₂Cl₂. A fase aquosa foi descartada e a fase orgânica foi concentrada dando um resíduo que foi purificado por cromatografia em coluna utilizando-se n-hexano e acetato de etila como eluente (95:5). Os cristais amarelos foram obtidos por meio de evaporação lenta do solvente. Ponto de fusão: 105-107,5 °C.

[1] Jonathan Clayden, Nick Greeves, Stuart Warren e Peter Wothers, Organic Chemistry, Ed. Oxford, 2001