

ELETRONESTEREOQUÍMICA: TEORIA DA CONVERSÃO DE UMA MISTURA RACÊMICA EM EXCESSO ENANTIOMÉRICO

Vagner Cunha Lima ¹

RESUMO

A síntese assimétrica direcionada para excesso enantiomérico ou síntese total de entidades é uma área da estereoquímica que apresenta três áreas de mais recorrência de síntese: (Nobel de 2021) Organocatálise; Organometálica; Enzimática. Na literatura da atualidade não existe a conversão da angulação rotacional de uma molécula quiral promovida por campo eletromagnético, dessa forma será quarta área e última da síntese orgânica assimétrica. A rotação maior que 360 graus de forma inversa que traduz a transformação de R-(entidade molécula assimétrica) á S-(entidade molécula assimétrica) é uma metodologia teórica que surgiu com esforço da imaginação do vislumbre de uma molécula polar na orientação do campo de micro-ondas e a orientação do Spin da magnetita férrica através transformação por campo magnético. Com base nas metodologias anteriores, a teoria reacional será uma inovação na síntese com melhoramento como: economia atômica; energética e ambiental com base em metais que promova essa reação. A abertura dessa reação não será geral para toda a síntese com o olhar da síntese isomérica ou reações que precise de geometria de catalisadores em relação a esfera de coordenação.

Palavra-chave: Eletronestereoquímica, Estereoquímica, Química Orgânica Teórica.

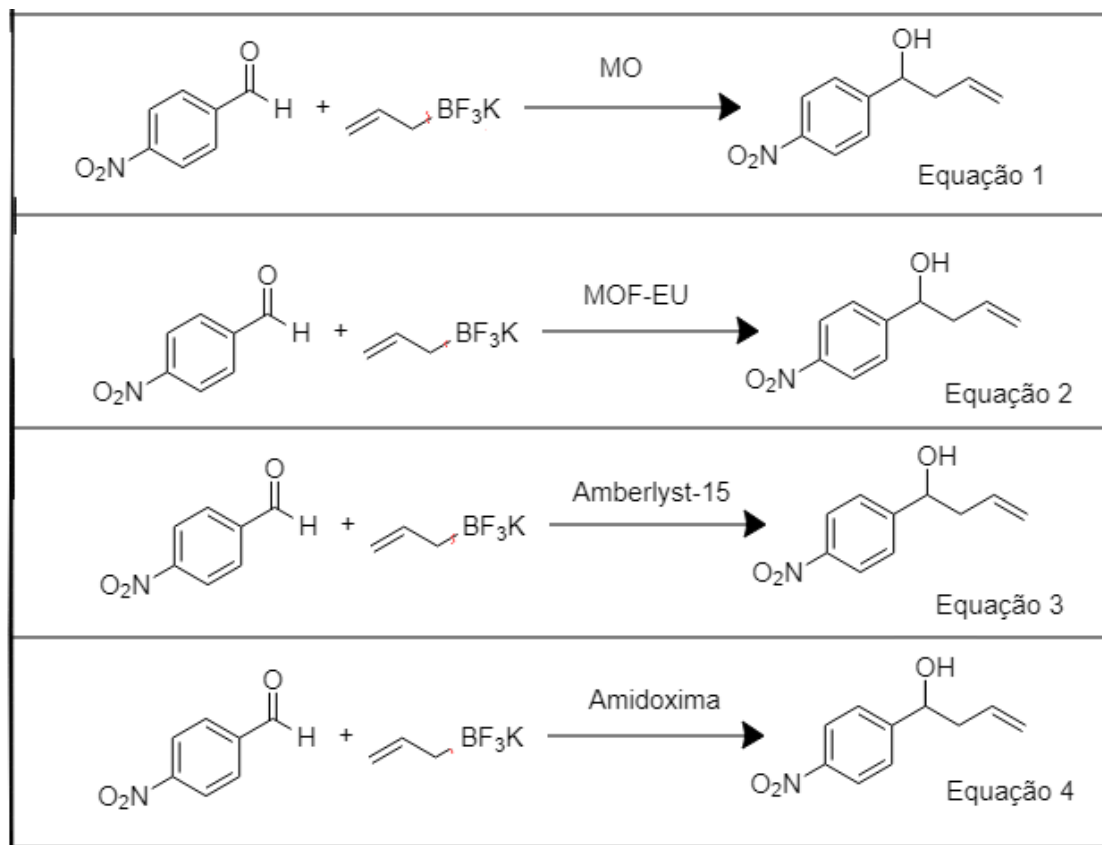
INTRODUÇÃO

Tomando como base o estudo teórico da reação de alilação, via as três rotas sintéticas com uso de metais, agilas ativas e ultrassom e outras metodologias, foi verificado na literatura que para uma reação assimétrica é usado metais de transição com quelantes orgânicos. Nas propostas de rotas sintéticas anteriores o uso de metais de transição é mais recorrente com objetivo de uma síntese mais delicada de produto enantiomérico de grupamento álcool e função C=C (SOUZA, 2015).

A reação de alilação promovidas por rotas de micro-ondas, ultrassom não apresenta a formação de um excesso enantiomérico que geralmente ocorre a formação de 50/ 50% S-R álcool homoalílico através das reações de alilação e de compostos carbonilados. A forma energética descrita apresenta ser mais adequado a reação de alilação de acordo como os 12 princípios da Química verde com adequação do não uso de catalisador, economia atômica, economia energética e outros fatores dos princípios (SILVA, 2015).

¹ Mestrando do Curso de **Química** da Universidade Federal – UFCG/UFRPE, vagner.picui@gmail.com.

Com análise entre as quatro rotas sintéticas, para um mesmo objetivo molecular, temos as equações químicas para a formação do álcool homoalílico, onde uma usa a energia de micro-ondas e as outras usam catalisadores de MOF de Európio e argila (**Quadro 1**). A quarta metodologia é usado ácido de Brønsted-Lowry (SILVA, 2015; SOUZA, 2015; ANDRADE, 2016).



Quadro 1: Equações que leva ao mesmo produto reacional.

No quadro 1, faz a discussão que metodologias diferentes de reações orgânicas podem levar ao mesmo produto. O pensamento geral para a pesquisa de diferentes rotas está relacionado com o lucro empresarial e ambiental. Analisando as equações temos que existe a formação de subprodutos reacionais derivado desde catalisadores a energia de micro-ondas como o subproduto em todas as reações o sal KBF_3OH . Analisando todas as rotas, a mais viável em relação ao lucro e ambiental é a equação 1, onde é usado a energia de micro-ondas, pois não há formação de produtos catalíticos. Dessa forma, ocorre a economia atômica e insumo. Então a pesquisa em química está direcionada desde novas descobertas, mas especificamente para o melhoramento de novas rotas sintéticas enfim de melhorar a síntese de medicamentos com atividade contra HIV, Leucemia da Célula B, moléculas antitumoral.

O álcool homoalílico são blocos de construção de moléculas ativas (Figura 1), onde temos a spirofused que é um grupo funcional natural que apresenta atividade biológica. Rotas sintéticas da atualidade vem sendo melhoradas de acordo com metodologias inovadoras de síntese que apresenta atividade bactericida e tumoral e outras atividades biológica ativa (XU, 2022 HU, 2019).

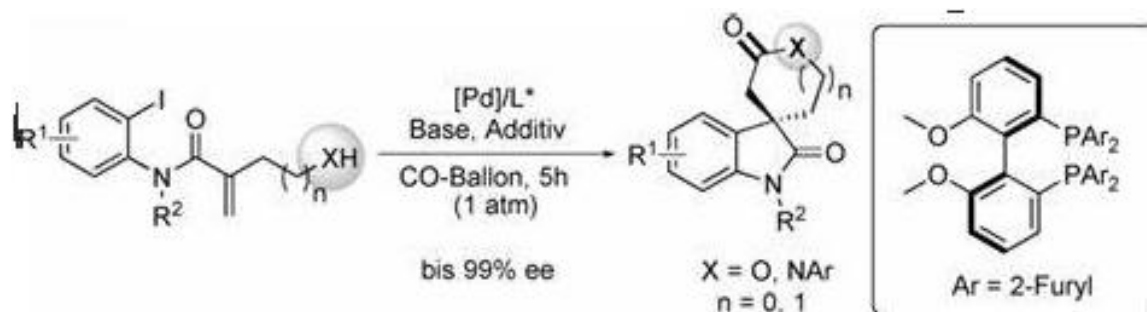


Figura 1: Lactonas spirofused e lactams.

Direcionado o olhar para a figura 1, temos um catalisador de Pd (paládio) que faz uma esfera de coordenação de número quatro. A síntese do produto que apresenta a configura específica está de acordo com a propriedade catalítica da esfera de coordenação entre o metal-ligante. De acordo com o (Figura 2), podemos vê como o processo ocorre.

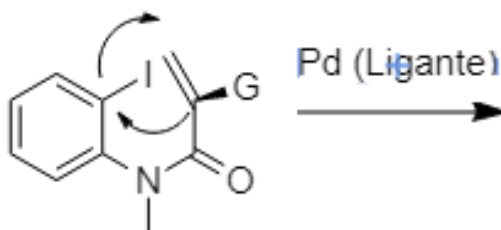


Figura 2: Reação de Substituição onde o Iodeto é o grupo de saída.

A geometria espacial do catalisador para essa reação, está além de fazer com que a molécula apresente uma configuração espacial específica, é acelerar a reação e fazer com que a reação apresente uma reação de substituição entre o iodeto do grupo aromático e o carbono alfa da carbonila. Dessa forma, a proposta do artigo não está direcionada para essa catálise ou catálise que apresente essa configuração. No estudo subsequente na metodologia, o estudo será direcionado para moléculas de álcool homoalílico que apresente uma síntese mais simples de entendimento.

METODOLOGIA DISCUSSIVA ANALÓGICA

O estudo feito na literatura da reação de alilação de compostos carbonilados por alitrifluoroborato de potássio com uso de ácido de Lewis pode ser vista na **figura 3**; como o catalisador gira no espaço; como foi sintetizado o produto.

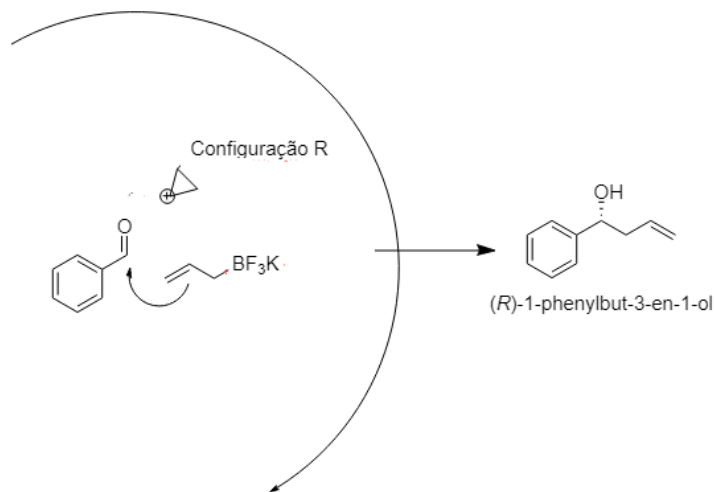
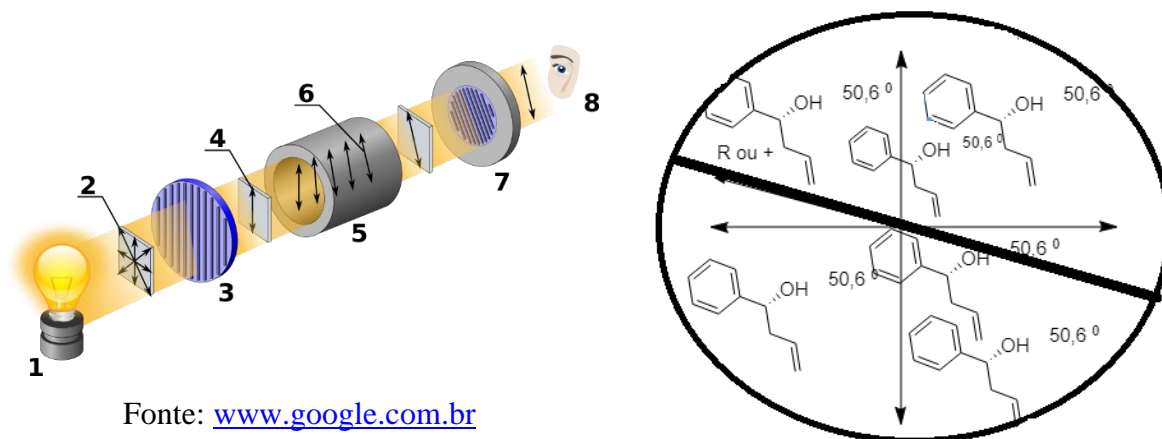


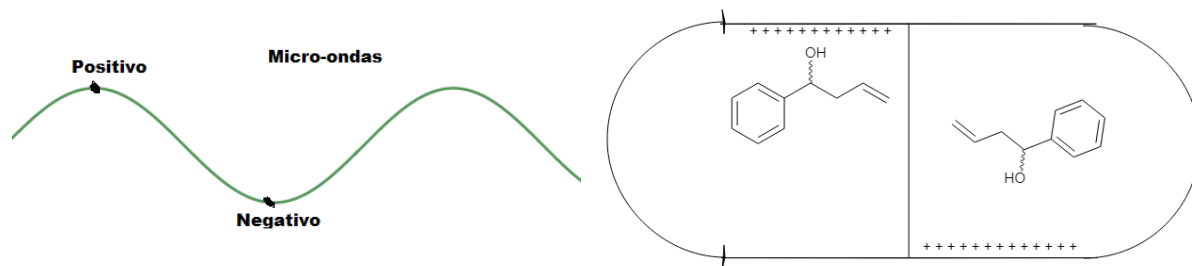
Figura 3: Reação de alilação catalisada por ácido de Lewis.

Dando sequência da ideia, foi visto que uma molécula que apresente atividade óptica R em relação ao seu produto está de acordo com atividade óptica do catalisador que gira em um plano específico de acordo com a **figura 3**. A imaginação é que a molécula (R)-1-fenilbut-3-en-1-ol apresenta um giro angular na solução como se todas estivesse enfileiradas acima e abaixo, onde que a luz em um ângulo de coordena (x,y) de centro (0,0) faz um ângulo de luz (**Esquema 1**).



Esquema 1: polarímetro.

A energia de micro-ondas, o campo eletromagnético com amplitude positiva alinha com o oxigênio da hidroxila e a depressão da onda que se chama parte negativa de amplitude fixa na parte positiva do carbono em virtude da eletronegatividade em relação ao deslocamento de carga por indução. Com a frequência de 2,4 MHz, a molécula do álcool homoalílico perde energia se movimentando na forma de calor fazendo uma constante diatérmica que é a conversão de calor em movimento. A rotação molecular não passa de 180° verificando que não a existência da transformação da mistura racêmica em excesso enantiomérico (Esquema 2).



Esquema 2: A radiação de micro-ondas interagindo com o álcool homoalílico.
Fonte: Vagner Cunha Lima

Relacionando ao estudo do campo cristalino, dos elétrons da magnetita férrica, temos que existe desdobramento da energia dos orbitais eletrônico provocado por campo magnético em uma bobina de tesla. Ao passar pelo o magnetismo, apresenta orientação dos elétrons e o desdobramento dos orbitais do material. Com base no procedimento experimental para o material, segue uma **equação geral 1**.

$$E = g_e \cdot \mu \cdot B \cdot m_s$$

Equação 1: Energia do desdobramento do campo cristalino

Finalizando a analogia, temos um campo cristalino que supostamente a solução do álcool homoalílico pode ser congelada, então é aplicado um campo magnético com uso da bobina de tesla analogicamente com uso de magnetita férrica (transformação do metal ferrita em um ímã férrica).

RESULTADO ANALÓGICO

O congelamento do álcool homoalílico derivado de uma reação no micro-ondas será submetido ao campo magnético em dois clicks, onde a molécula passa de uma orientação de 180° e depois 181° para ter uma configuração final de R ou S-álcool homolílico de acordo (Figura 3).

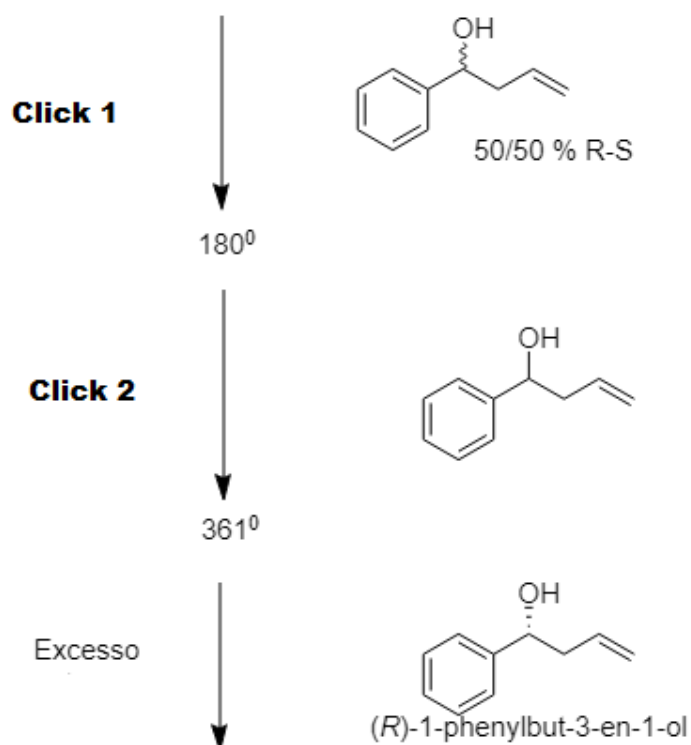


Figura 3: Álcool homoalílico congelado passando por um campo magnético na bobina de tesla analogicamente feito como a magnetita férrica para tentar girar a molécula em um plano com giro maior de $G > 360^\circ$.

Fonte: Vagner Cunha Lima

Com finalidade, essa transformação magnética não será aplicada para síntese que envolva metais de transição em relação ao uso específico de esfera de coordenação, molécula que apresenta uma isomérica ou reação isomérica como cicloadição [4+2] ou outras reações de ciclo adição. A proposta geral é fazer com que a molécula gire mais de 360° para ter uma configura R ou S que o campo magnético aplicado B será de acordo com cada molécula envolvida.

CONCLUSÃO ANALÓGICA

O Trabalho teórico foi pensado com a visualização da reação de alilação no micro-ondas e o efeito conforme analogia da magnetita férrica. Dessa forma, foi pensado se uma mistura racêmica pode ser transformado em um excesso enantiomérico ou um enantiômero por campo magnético? É UM trabalho teórico que não existe na literatura e nem no campo do estudo da estereoquímica, onde O Prêmio Nobel de 2021 foi catálise enantiomérica com uso de catalisador orgânico, ou seja, área da organocatálise.

AGRADECIMENTOS

Ao Universo e o Criador das estrelas, onde todos os meus átomos são fonte de sua existência;
Às meninas que sempre gosto de conversar; Família-amigos; A Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Saúde e Educação *Campus* Cuité-PB; A Universidade Rural do Pernambuco, *Campus* Recife-PE; À FACEPE (Fundação de Amparo a Ciência e Tecnologia do Estado do Pernambuco).

REFERÊNCIAS

SOUZA, Túlio Ricardo Couto de Lima. Métodos verdes de alilação de aldeídos com organotrifluoroboratos. 2015.

SILVA, Gilson Bezerra da. Aplicação de Reagentes de Boro e Estanho na Síntese de Álcoois Homoalílicos. 2015.

ANDRADE; FREITAS FILHO; FREITAS, APPLICATION OF AMIDOXIMES AS CATALYSTS FOR THE ALLYLATION REACTION BY POTASSIUM ALLYLTRIFLUOROBORATE IN ORGANIC BIPHASIC. **Química Nova**, v. 39, p. 1225-1235, 2016.

XU, Shiyu *et al.* Organocatalytic Enantioselective Construction of Spiroketal Lactones Bearing Axial and Central Chirality via an Asymmetric Domino Reaction. **Organic Letters**, v. 24, n. 16, p. 2978-2982, 2022.

HU, Huaanzi *et al.* Enantioselective Synthesis of 2-Oxindole Spirofused Lactones and Lactams by Heck/Carbonylative Cyclization Sequences: Method Development and Applications. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 58, n. 27, p. 9225-9229, 2019.