

DISSENY, SÍNTESI I ESTUDI D'ORGANOCATALITZADORS ASIMÈTRICS SOLUBLES EN AIGUA

Víctor Cuesta^{1*} i Albert Moyano¹

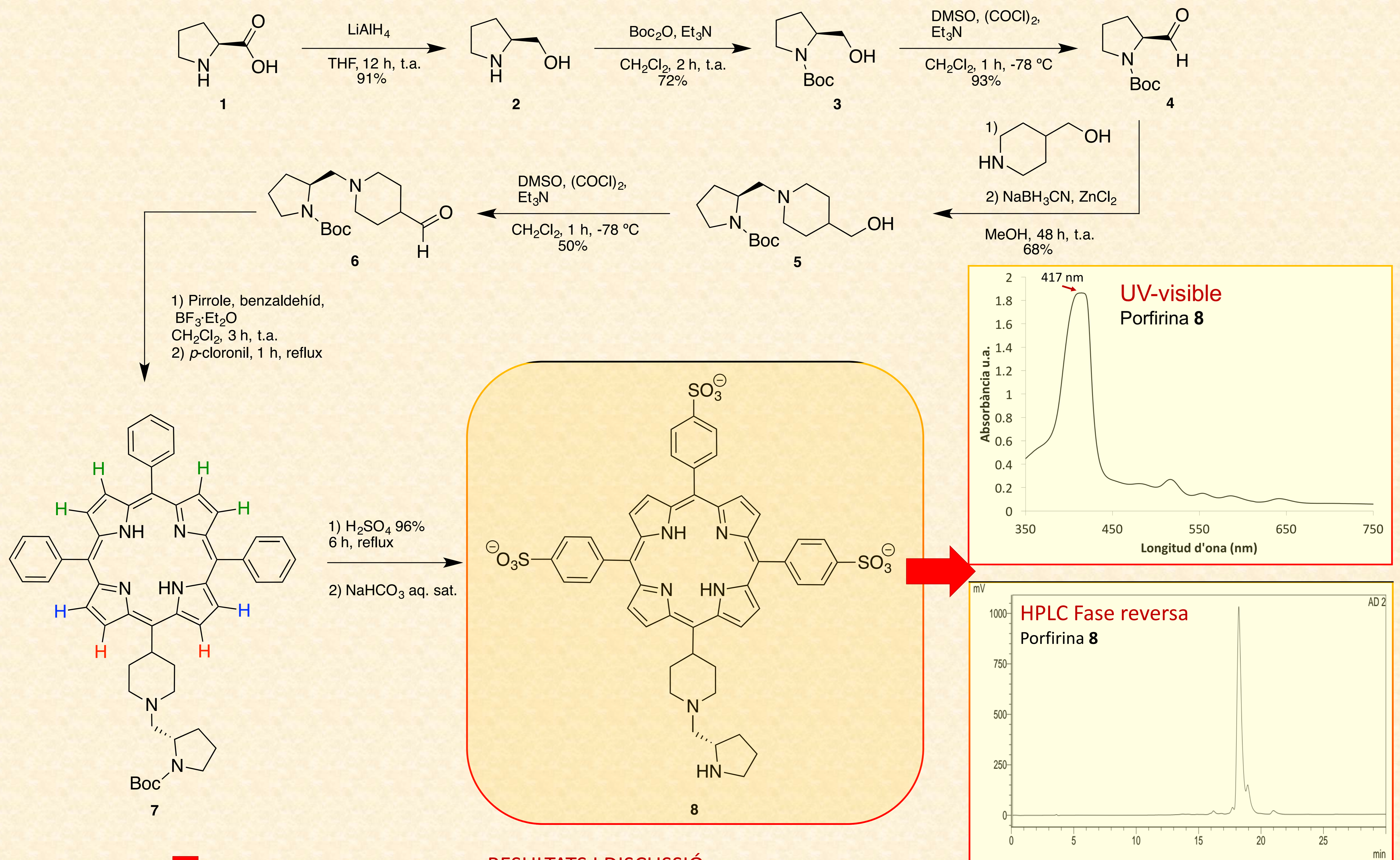
¹ Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Universitat de Barcelona, Facultat de Química, C. Martí i Franquès 1-11, 08028 - Barcelona, Catalunya, Espanya

*vcuesttu7@alumnes.ub.edu

INTRODUCCIÓ

L'organocatàlisi asimètrica és un camp d'investigació molt treballat durant els últims anys, degut a l'assequibilitat i manca de toxicitat d'aquest tipus de catalitzadors. No obstant, encara no s'han desenvolupat suficients mètodes per dur a terme reaccions organocatalítiques enantioselectives en medi aquós.

El nostre objectiu amb aquesta investigació és trobar un compost soluble en aigua, que pugui actuar com un organocatalitzador asimètric. Per tal de fer-ho, s'ha dissenyat una porfirina quiral **8** amb grups sulfonil que li permetin solubilitzar-se en aigua i que es pugui recuperar fàcilment. Una característica de les porfirines sulfonades és que en medi àcid s'autoensamblen i formen agregats quirals que trenquen espontàniament la simetria,¹ el que pot afavorir l'estereoselectivitat de la reacció. A més, els productes de reacció es poden extreure fàcilment rentant amb un dissolvent orgànic; a la fase aquosa romandria només el catalitzador que es podria recuperar i reutilitzar posteriorment.



RESULTATS I DISCUSSIÓ

Per sintetitzar la porfirina **7**, necessitem l'aldehid quiral **6** que es prepara a partir de la L-prolina **1**. El pas clau de la síntesi es l'aminació reductiva per obtenir l'amino alcohol **5**. Utilitzant un mètode que es basa en un complex del NaBH₃CN amb el catió Zn²⁺ s'aconsegueix que la reacció tingui lloc.²

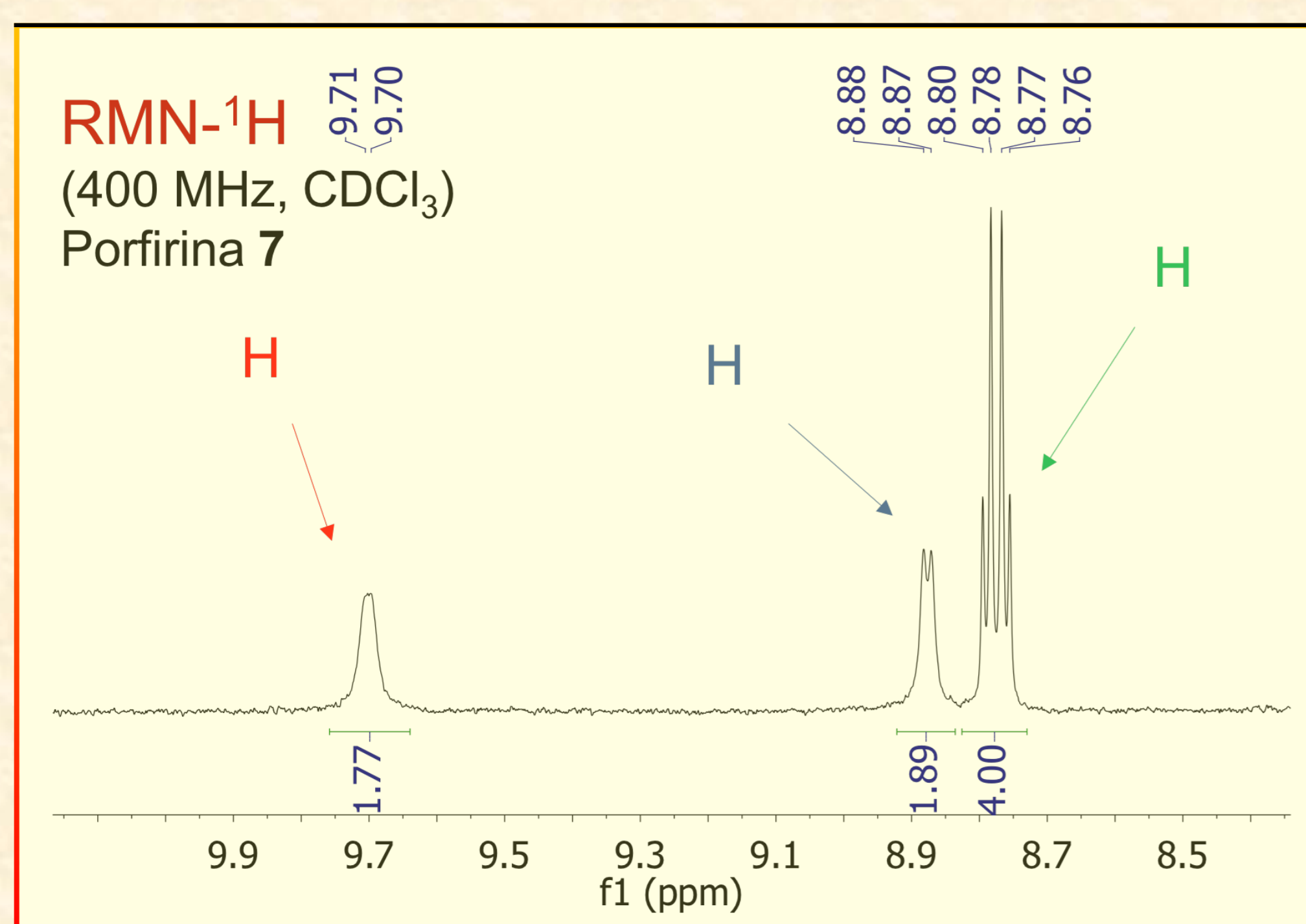
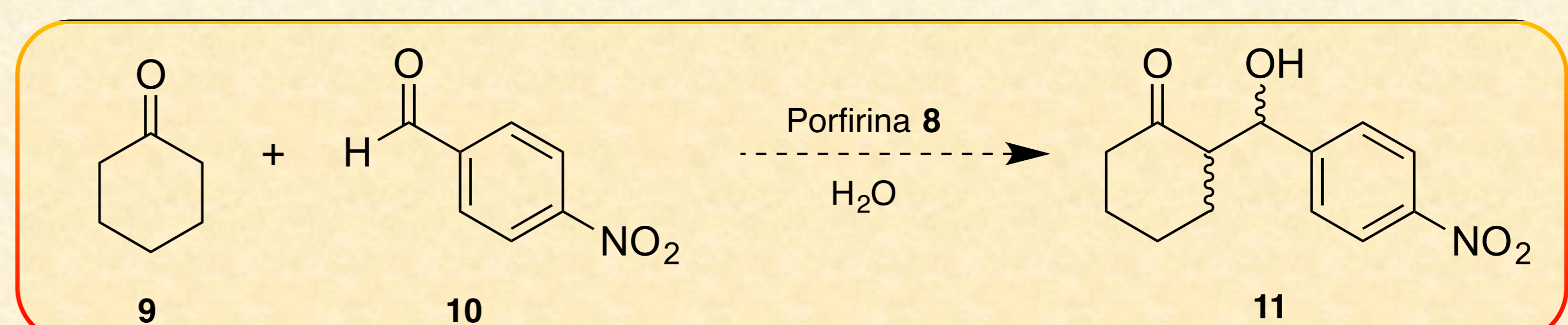
Aquesta porfirina **7** es sintetitza a partir d'una condensació mixta de l'aldehid quiral **6** (1 eq.), benzaldehyd (3 eq.) i pirrole (4 eq.). Aquestes proporcions dels reactius són les òptimes per a obtenir la porfirina monosubstituída com a producte majoritari. Per RMN-¹H es comprova que efectivament es forma aquesta porfirina.

Seguidament es sulfona amb àcid sulfúric per obtenir únicament la porfirina **8** com indica l'HPLC en fase reversa. Per espectrofotometria UV-visible s'observa la banda característica de les porfirines a la longitud d'ona de 417 nm.

CONCLUSIONS

S'ha aconseguit sintetitzar la porfirina **8**, el organocatalitzador desitjat, mitjançant una síntesi de 7 etapes.

Per continuar el treball es realitzaran diverses reaccions aldòliques a diferents pH catalitzades per la porfirina **8** via enamina. Una possible reacció podria ser entre la ciclohexanona **9** i el *p*-nitrobenzaldehyd **10**.



REFERÈNCIES

- Z. El-Hachemi, C. Escudero, O. Arteaga, A. Canillas, J. Crusats, G. Mancini, R. Purrello, A. Sorrenti, A. D. Urso and J. M. Ribo, *Chirality*, 2009, **21**, 408–412.
- A. Fernandes, L. de Almeida, P. E. Ferreira, M. J. Marques, R. P. Rocha, L. F. L. Coelho, D. T. Carvalho and C. Viegas, *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 2015, **25**, 3346–3349.