

Síntese de sais imidazólicos com potencial antifúngico a partir da metátese cruzada de fenilpropenóides

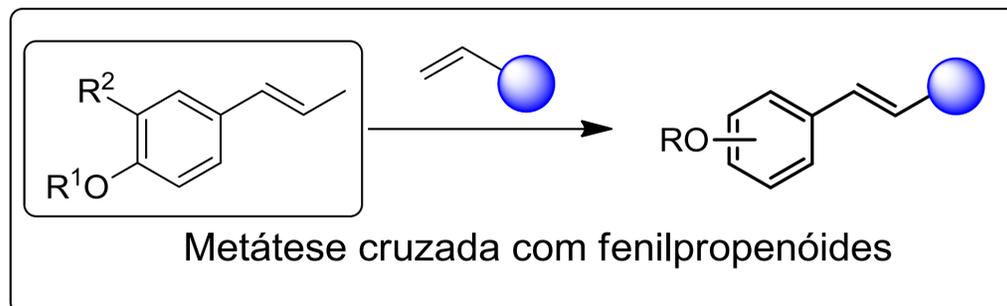
Joana de Conto Zanchetti, Henri Stephan Schrekker

Laboratório de Processos Tecnológicos e Catálise, Instituto de Química, UFRGS



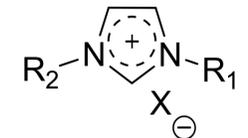
Fenilpropenóides

Potencial substrato para reações de metátese cruzada



Lummiss, J. A. M.; Oliveira, K. C.; Pranckevicius, A. M. T.; Santos, A. G.; dos Santos, E. N.; Fogg, D. E. *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 18889-18891.

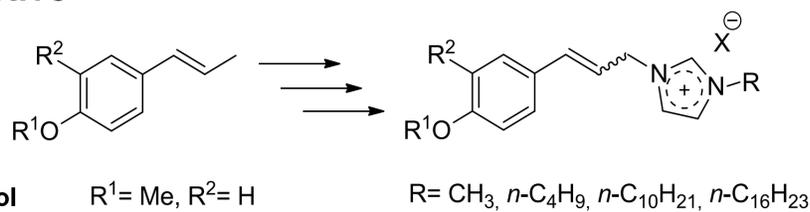
Sais Imidazólicos



Atividade contra microorganismos patogênicos

Schrekker, H. S.; Donato, R. K.; Fuentefria, A. M.; Bergamo, V.; Oliveira, L. F.; Machado, M. M. *Med. Chem. Comm.* **2013**, *4*, 1457-1460.

Objetivo



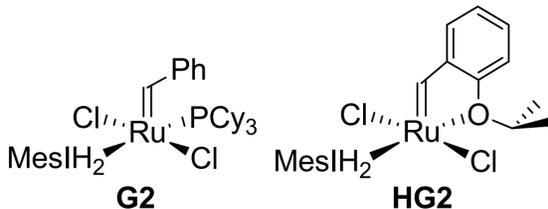
Anetol
Isoeugenol
Isosafrol

Produtos de origem natural

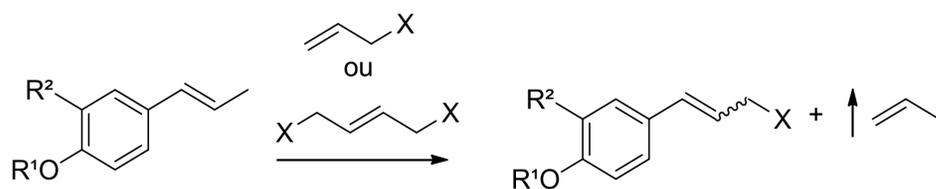
Compostos com potencial atividade biológica

Experimental

Catalisadores de metátese



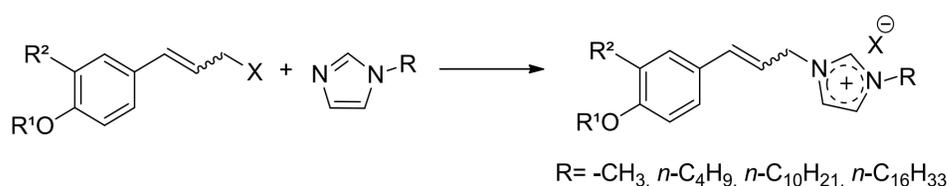
Primeira etapa: metátese cruzada dos fenilpropenóides



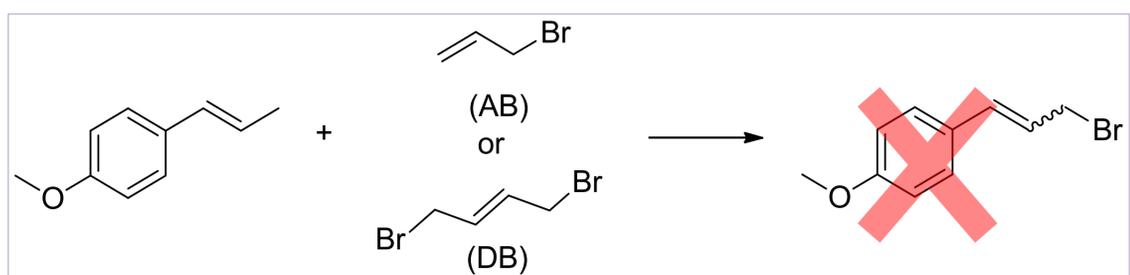
X = Cl ou Br

Anetol R¹ = Me, R² = H
Isoeugenol R¹ = H, R² = OMe
Isosafrol R¹^R² = -CH₂O-

Segunda etapa: alquilação do 1-alquilimidazol



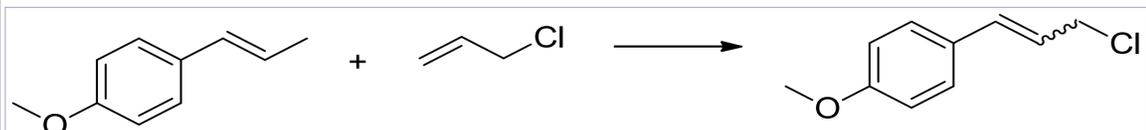
Resultados



Entrada	Equiv SMC	Conversão (%)
1	1 (AB)	89
2	2 (AB)	86
3	4 (AB)	80
4	2 (DB)	88

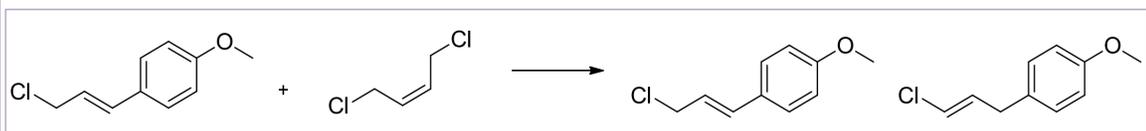
Condições: 1 mol% HG2, DCE, 50 °C, 120 min. SMC = substrato de metátese cruzada.

O produto desejado não foi observado e o GC-MS indicou a formação de um produto de alta massa molecular.



Condições: Anetol:cloreto de alila = 1:2, 1 mol% HG2, DCE, 50 °C, 120 min.

Conversão: 78%. Rendimento: 72%.
Proporção cis/trans: 7:93



Condições: Anetol: cloreto de alila = 1:2, 1 mol% G2, DCE, 50 °C, 120 min.

Conversão: 88%. Rendimento: 70%.
Proporção de isômeros: 3:97

Conclusões

- Brometo de alila e 1,4-dibromo-2-buteno como substratos de metátese cruzada não gerou os produtos desejados;
- Cloreto de alila é um substrato promissor para metátese cruzada com o anetol. Essa reação será futuramente explorada e aplicada aos outros fenilpropenóides;
- Os produtos da metátese serão usados como agentes alquilantes para alquilimidazóis para obter os sais imidazólicos correspondentes.
- Serão feitos testes biológicos com esse sais imidazólicos.

Agradecimentos

