



Conectando vidas Construindo conhecimento



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Síntese de novos heterociclos derivados de diidropirimidin-2-tionas a partir da reação de Biginelli seguida por esterificação intramolecular
Autor	PABLO PITOL SILVEIRA
Orientador	VERA LUCIA EIFLER LIMA

Síntese de novos heterociclos derivados de diidropirimidin-2-tionas a partir da reação de Biginelli seguida por esterificação intramolecular

Autor: Pablo Pitol Silveira

Orientadora: Profa. Dra. Vera Lucia Eifler-Lima

Instituição de Origem: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

As diidropirimidinonas (DHPMs) são compostos obtidos de maneira rápida e fácil por meio da reação multicomponente (RMC) de Biginelli. Elas têm sido descritas na literatura, após a descoberta do monastrol, como estruturas com atividades antivirais, antiparasitárias, antioxidantes e principalmente antineoplásicas. Um dos alvos mais estudados para essas moléculas é a cinesina Eg5. Ela é uma proteína motora que regula o fuso de alongamento na prófase, o que contribui para a separação dos centrossomos durante a metáfase. Dessa forma, a inibição da Eg5 interrompe o ciclo celular na fase G₂/M e gera apoptose. Além da Eg5, as DHPMs têm potencial de atuarem na enzima ecto-5'-nucleotidase (ecto-5'-NT). Essa proteína participa do controle dos níveis extracelulares de adenosina, nucleosídeo que tem a capacidade de agir na proliferação, morte e invasão celular em diferentes neoplasias. Inicialmente, este trabalho previa a obtenção de novos heterociclos N1 e C5 substituídos a partir da reação de Biginelli entre β-cetoésteres, ariltiouréias funcionalizadas e 2-hidroxibenzaldeído em presença de cloreto de trimetilsilano (TMSCl) seguido por hidrólise alcalina e esterificação de Steglich intramolecular. Posteriormente, as moléculas obtidas seriam submetidas a testes antitumorais *in vitro*. Entretanto, por conta da restrição total de acesso aos laboratórios durante a pandemia da covid-19, nada disso foi possível de ser feito. Ainda assim, no período anterior à pandemia, foi realizada a síntese de cinco outras DHPMs inéditas. Estes compostos, quando comparados com o monastrol, têm modificações focadas na posição N1. Tais modificações têm como base estudos *in silico* realizados pelo grupo de pesquisa que demonstram favorecimento na interação com a Eg5. As novas moléculas sintetizadas apresentaram ótimo grau de pureza, rendimentos entre bons e moderados e foram totalmente caracterizadas por Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de ¹H e de ¹³C.