



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



Evento	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2016
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Planejamento e síntese de derivados triazolados da 4-metilclorocumarina
Autor	THAÍS MUNHOZ
Orientador	VERA LUCIA EIFLER LIMA

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Aluna: Thaís Munhoz

Orientadora: Vera Lucia Eifler Lima

Título do trabalho: Planejamento e síntese de derivados triazolados da 4-metilclorocumarina

INTRODUÇÃO

Cumarinas são originalmente metabólitos secundários de plantas das famílias *Rutaceae* e *Umbeliferae*, incluindo cumaru e lavanda. Apresentam diversas atividades farmacológicas, destacando-se as atividades anticoagulante, antifúngica, antioxidante, anti-inflamatória, antibacteriana, antitumoral e citotóxica e anti-leishmaniose; estando estas associadas à baixa toxicidade.

Quimicamente, compreendem um grande grupo de compostos fenólicos, formados da fusão de um benzeno e um anel α -pirona, conhecidos como benzopironas. Estruturalmente são lactonas do ácido *o*-hidróxi-cinâmico, sendo o representante mais simples a 1,2-benzopirona. A síntese de cumarinas pode ocorrer por diferentes reações, entre elas, a reação de Pechmann. Essa reação permite a síntese de cumarinas pela condensação de um fenol com β -cetoéster, conduzindo ao produto metilado na posição 4, na presença de um ácido de Brønsted ou de Lewis.

Recentemente, no grupo de pesquisa do Laboratório de Síntese Orgânica Medicinal, tem-se sintetizado 4-metilcumarinas com atividades antioxidantes e antitumorais. Sintetizou-se uma série de derivados triazolados na posição 7 com atividade antioxidante e antitumoral. Os triazóis, por possuírem aromaticidade e três nitrogênios trissubstituídos, são ricos em elétrons podendo se ligar a enzimas e receptores no meio biológico, conferindo-lhes um amplo espectro de atividades biológicas.

De acordo com esses resultados, objetivou-se sintetizar 4-clorometilcumarinas via reação de Pechmann com variações na posição 6 do anel aromático através de reações de *click chemistry* na tentativa de aumentar a atividade antioxidante das cumarinas.

METODOLOGIA

Na primeira etapa, foi obtido a 6-hidroxi-4-metilcumarina através da condensação de Pechmann entre o 1,4-benzenodiol e o 4-cloroacetoacetato de etila. Após, o composto obtido da primeira etapa foi alquilado com brometo de propargila da seguinte maneira: 2 horas em ultrassom e 7 dias sob agitação à temperatura ambiente; gerando um alcino na posição 6 da cumarina. Esse alcino reagiu com diversas azidas em presença de sulfato de cobre e ascorbato de sódio, gerando derivados triazolados na posição 6 da 4-metilcumarina. A última etapa foi realizada em reator de micro-ondas.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os intermediários gerados na primeira e segunda etapa foram obtidos com rendimentos satisfatórios (42 e 71% respectivamente), sem necessidade de purificação por coluna cromatográfica. Os produtos tiveram rendimentos variáveis (58-91%), também satisfatórios. As estruturas foram confirmadas por FT-IR e ^1H RMN. Testes antioxidantes deverão ser feitos para avaliar a atividade antioxidante dos compostos sintetizados.