



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 | Síntese Enantiosseletiva de 3-Etil Ftalidos via Adição Catalítica Assimétrica de Reagentes Organozinco |
| Autor | VICTÓRIA GOULART ISOPPO |
| Orientador | DIOGO SEIBERT LÜDTKE |

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE QUÍMICA

Título do trabalho: Síntese Enantiosseletiva de 3-Etil Ftalidos via Adição Catalítica Assimétrica de Reagentes Organozinco

Orientador: Diogo S. Lüdtkke

Aluna: Victória Goulart Isoppo

Ao longo dos últimos anos a química das 3-*H*-isobenzofuranonas, comumente denominada ftalidos, tem despertado um grande interesse em diversos grupos de pesquisa ao redor do mundo. Essas moléculas são encontradas em diversos produtos naturais e estão associadas a uma gama de atividades biológicas, desde ações anti-AVC, anti-HIV até antifúngica e antioxidante. Os ftalidos são compostos orgânicos naturais que apresentam como característica estrutural básica 2 núcleos condensados, um derivado do anel benzênico e o outro derivado de uma γ -lactona. Como geralmente as atividades biológicas apresentadas por esses compostos estão associadas à configuração absoluta do centro estereogênico, presente na posição 3, este trabalho visa à síntese enantiosseletiva de compostos do tipo 3-etil ftalidos, através da adição estereosseletiva de reagentes organozinco aos orto-formil benzoatos, na presença de ligantes quirais derivados de amino naftóis.

A parte inicial dos estudos foi concentrada na síntese do ligante quiral. A reação para a síntese desse composto é realizada através de uma reação simples e direta, *one-pot*, sem a presença de solvente. Em um segundo momento, sintetiza-se em laboratório o aldeído funcionalizado que será utilizado como substrato, com rendimento de 70%. Com estes reagentes em mãos, parte-se para a síntese dos ftalidos, começando-se pela reação entre Et_2Zn e o ligante em tolueno, a temperatura ambiente durante 20 minutos formando assim o catalisador da reação.. Após, é adicionado o substrato preparado anteriormente, para a formação do 3-etil ftalido correspondente. As condições reacionais vêm sendo otimizadas, mas até o presente momento, a melhor condição encontrada é aquela que ocorre à temperatura ambiente durante 48 h na presença de 20 mol % do ligante quiral, formando o produto com 95 % de rendimento e 74 % de excesso enantiomérico.

Devido a problemas de separação do produto com o ligante quiral, foi utilizada a metodologia de padronização interna no cromatógrafo gasoso com um detector de ionização de chama (CG – DIC) para o cálculo dos rendimentos. O método consiste em adicionar quantidades conhecidas do produto racêmico e, também, de um padrão interno undecano para a construção da curva de calibração visando a determinação do fator de resposta correspondente ao coeficiente angular da reta. O produto racêmico é preparado através da reação de Grignard, em que o reagente é preparado com magnésio e bromoetano na presença de iodo, e após a sua formação é adicionado o substrato.

Os produtos obtidos foram caracterizados por RMN de ^1H e ^{13}C . Para a determinação do excesso enantiomérico foi utilizado a técnica de Cromatografia Líquida de Alta Eficiência com colunas de fase estacionária quiral.