



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 | REAÇÕES MULTICOMPONENTES COMBINADAS COM REAÇÕES DO TIPO CLICK NA PREPARAÇÃO DE COMPOSTOS HETEROCÍCLICOS HÍBRIDOS |
| Autor | MARCELA FERNANDES BARBOSA LESSA |
| Orientador | DENNIS RUSSOWSKY |

Autora: Marcela Fernandes Barbosa Lessa
Orientador: Prof. Dr. Dennis Russowsky
Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

REAÇÕES MULTICOMPONENTES COMBINADAS COM REAÇÕES DO TIPO CLICK NA PREPARAÇÃO DE COMPOSTOS HETEROCÍCLICOS HÍBRIDOS

As reações multicomponentes (MCR) são reações em que três ou mais reagentes são adicionados no mesmo meio reacional gerando um produto que possui porções dos reagentes de partida. Com esse método é possível produzir moléculas de forma econômica e permite a criação de uma biblioteca de compostos, simplificando o processo de descoberta de novos produtos com atividades biológicas.¹ A reação de Biginelli é um exemplo de reação que combina três reagentes, sendo de grande utilidade na síntese de 3,4-dihidropirimidin-(1H)-2-onas (DHPM). Essa reação ocorre genericamente através da ciclocondensação de um aldeído aromático, um β -cetoéster e uréia.²

As chalconas são flavonoides quimicamente conhecidas como cetonas α,β -insaturadas. Apresentam atividades biológicas multifatoriais³ e podem ser facilmente sintetizadas a partir da reação de condensação aldólica entre um aldeído e uma acetona, tipicamente aromáticos. A reação de Huisgen (do tipo *Click*) permite a hibridização de duas moléculas, de maneira simples e termodinamicamente favorável. A reação é rápida e apresenta elevados rendimentos.⁴ Temos como objetivo a hibridização de DHPM e chalconas através da reação do tipo *Click* de forma a produzir híbridos que possuam atividades biológicas de ambos compostos.

Foram realizadas propargilações de hidróxi-benzaldeídos com brometo de propargila e K_2CO_3 como base, fornecendo os produtos com rendimentos entre 78% e 95%. A seguir, os benzaldeídos oxi-propargilados foram submetidos a condensações aldólicas com acetofenona na presença de NaOH, originando as respectivas chalconas com rendimentos de 60% e 82%. Concomitantemente, a reação de Biginelli entre benzaldeído, uréia e 4-cloroacetato de etila, seguida de azidação com NaN_3 , mostrou rendimento global de 88%. De posse das chalconas contendo uma porção alcino e da DHPM com uma porção azida foram realizadas reações do tipo *Click* para a obtenção dos compostos híbridos com rendimentos entre 75% e 90%. Todos os compostos sintetizados tiveram suas estruturas comprovadas por Ressonância Magnética Nuclear de 1H e ^{13}C e por ponto de fusão. A construção de diferentes estruturas híbridas chalcona-DHPM está em andamento para posterior investigação de atividade biológica.

1. Herrera, R.P.; Marques-Lopez, E. in *Multicomponent Reactions: Concepts and Applications for Design and Synthesis*, 2015, John Wiley & Sons: New Jersey.
2. Kappe, C.O.; Stadler, A. The Biginelli dihydropyrimidinone synthesis. *Organic Reactions*, 2004, Vol. 63, pp. 1-116, John Wiley & Sons: New Jersey.
3. Singh, P.; Anand, A.; Kumar, V. *Eur. J. Med. Chem.* **2014**, 85, 758.
4. Winter, E.; Neuenfeldt, P.D.; Chiaradia-Delatorre, L. D.; Gauthier, C.; Yunes, R. A.; Nunes, R. J.; Creczynski-Pasa, T. B.; Di Pietro *J. Med. Chem.* **2014**, 57, 2930.