



XXXV SALÃO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

6 a 10 de novembro

Evento	Salão UFRGS 2023: SIC - XXXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2023
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Benzazóis como sondas fluorescentes de DNA - síntese e caracterização
Autor	LYNZA FREITAS HOLANDA
Orientador	SIMONE CRISTINA BAGGIO GNOATTO

Os marcadores fluorescentes têm função essencial no imageamento celular. Porém, diversas estruturas bioquímicas também possuem fluorescência, o que pode levar a resultados não ideais. Portanto, para contornar esse obstáculo, pode-se usar moléculas que fluorescem através do fenômeno *Excited State Intramolecular Proton Transfer* (ESIPT), o que faz com que essas sondas possuam um elevado deslocamento de Stokes, e um elevado rendimento quântico diminuindo a interferência da fluorescência da matriz biológica. Logo, foram realizados experimentos prévios *in silico*, com a intenção de desenvolver sondas fluorescentes de DNA da classe dos benzazóis, cujo mecanismo de fluorescência se dá via ESIPT. Foi executado uma triagem computacional através do *Docking*, de 150 moléculas derivadas de benzazóis, onde foram selecionadas as 5 melhores, as quais foram submetidas a um estudo de Dinâmica Molecular. Assim, este projeto propõe a síntese orgânica de um derivado benzimidazólico que terá como função ser uma sonda fluorescente de DNA. Então a síntese de um dos derivados se deu de maneira que foram realizadas reações de substituição eletrofílica aromática no composto clorobenzeno, onde foram realizadas reações de sulfonação e nitração, e após as reações de substituição nucleofílica aromática e redução, pode-se obter o composto 1,2,3-triaminobenzeno. Esse composto reagirá com um derivado dibenzilamínico do ácido salicílico, e com ácido polifosfórico, que atua como catalisador e solvente da reação, a fim de obter o produto final desejado que, assim como todos componentes dessa rota sintética, serão purificados pelos métodos de cromatografia em coluna e recristalização. Ao final dessas etapas, a molécula será caracterizada através da Ressonância Magnética Nuclear (^1H -RMN e ^{13}C -RMN) e Espectroscopia de massas. Finalmente, para avaliar o potencial da molécula como sonda fluorescente de DNA, serão feitos ensaios biológicos, toxicológicos e fotoquímicos na mesma.