

303

SÍNTESE DE CUMARINAS VIA REAÇÃO DE ACOPLAMENTO HECK. Priscila B. Silveira, Vanusa R. Lando, Adriano L. Monteiro (Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, UFRGS).

As cumarinas são compostos amplamente distribuídos no reino vegetal, mas que também podem ser encontradas em fungos e bactérias. Na área de medicamentos, destacam-se como precursores de anticoagulantes orais, além de possuírem diversas propriedades farmacológicas, entre elas de imunossupressora, hipotensora, inibidor da atividade plaquetária e, mais recentemente, atividade anti-HIV. Estruturalmente são lactonas do ácido *o*-hidróxi-cinâmico e no vegetal são sintetizadas a partir da fenilalanina. Os métodos clássicos para síntese de cumarinas possuem alguns inconvenientes tais como quantidades estequiométricas dos ácidos minerais ou de Lewis, utilização de reagentes tóxicos, temperaturas muito elevadas. Poucas aplicações são encontradas de catálise com metais de transição na síntese de cumarinas e as existentes apresentam limitações. Estamos desenvolvendo um método para a obtenção de precursores cumarínicos, através da reação entre iodetos de arila com o éster fenilacrilato de metila (Reação de Heck), utilizando como catalisador o ciclopaladato de enxofre [$(C_{12}H_{17}ClSPd)_2$], solvente a dimetilacetamida e como base a trietilamina. A proporção 1/1000 foi determinada como sendo a razão substrato/catalisador mais adequada e 100°C a melhor temperatura. A utilização do sal brometo de tetrabutilamônio como aditivo, teve influência positiva pois levou ao aumento da conversão e rendimento. Com o sistema otimizado e utilizando como substrato o iodobenzeno, pode-se obter o produto desejado com 96% de conversão, 71% de rendimento por CG e 60% isolado (18% de rendimento para bifênica). A reação mostra uma grande regioseletividade (em torno de 96%) para o isômero E. Este sistema está sendo aplicado para outros halogenetos de arila, que após isolados e caracterizados, serão testados na reação de fechamento do anel. (FAPERGS).