SÍNTESE CATALÍTICA DE SELENETOS DE DI-INDOÍLA ATRAVÉS DE REAÇÕES DE ATIVAÇÃO C-H

Julia Rosa Menezes [1]

Julia Rosa Menezes [2]

Maria Eduarda Candido Thedy [3]

Juliano Braun De Azeredo [4]

Resumo:

Os compostos orgânicos contendo átomos de selênio são estruturas que apresentam grande potencial biológico em razão de suas atividades antioxidantes. Assim, o desenvolvimento de estratégias de síntese desses compostos torna-se de grande importância para a descoberta de novos fármacos. Por outro lado, o núcleo indólico está presente na estrutura de diversas moléculas com atividade biológica, sendo, portando, a sua funcionalização de grande relevância. Assim, o presente trabalho trata-se da funcionalização do indol, com o selênio elementar, de modo a se obter o seleneto de di-indoíla, através de uma reação catalítica usando como catalisador reagentes de ferro, cobre e índio. A partir dos resultados obtidos, a metodologia mostrou-se satisfatória, apresentando resultados com rendimentos bastante significativos, dados a dificuldade em se realizar reações de ativação C-H em indóis. Cabe salientar também, que este trabalho ainda está em desenvolvimento, uma vez que as próximas etapas deverão ser realizadas variações estruturais dos indóis de modo a se obter uma série de compostos dessa classe de funcionalizados com selênio.

Palavras-chave: Seleneto de di-indoíla, sêlenio, indol

Modalidade de Participação: Iniciação Científica

SÍNTESE CATALÍTICA DE SELENETOS DE DI-INDOÍLA ATRAVÉS DE REAÇÕES DE ATIVAÇÃO C-H

[1] Aluno de graduação. juliarosa.m@hotmail.com. Autor principal

[2] Aluno de graduação. juliarosa.m@hotmail.com. Apresentador

[3] Estudante de graduação em fármacia. eduardacthedy17@gmail.com. Co-autor

[4] Docente. julianoazeredo@unipampa.edu.br. Orientador

SÍNTESE CATALÍTICA DE SELENETOS DE DI-INDOÍLA ATRAVÉS DE REAÇÕES DE ATIVAÇÃO C-H

1 INTRODUÇÃO

Os compostos orgânicos contendo átomos de selênio são estruturas que apresentam grande potencial biológico (NOGUEIRA, et.al. 2004) em razão de suas atividades antioxidantes (SANTORO, et.al. 2014). Assim, o desenvolvimento de estratégias de síntese desses compostos torna-se de grande importância para a descoberta de novos fármacos. Por outro lado, o núcleo indólico está presente na estrutura de diversas moléculas com atividade biológica, sendo, portando, a sua funcionalização de grande relevância (AZEREDO, et.al. 2014).

Assim, o presente trabalho trata-se da funcionalização do indol (1), com o selênio elementar (2), de modo a se obter o seleneto de di-indoíla (3), através de uma reação catalítica usando como catalisador reagentes de ferro, cobre e índio.

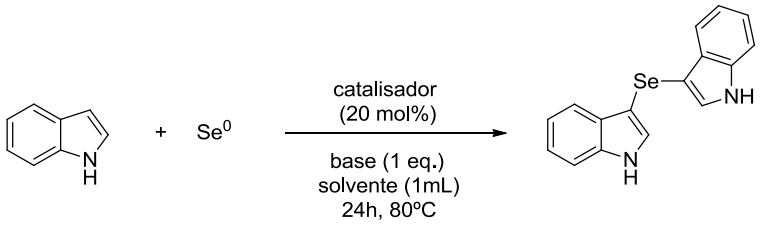
2 METODOLOGIA

As reações ocorreram a uma temperatura de 80ºC em 24 horas, as mesmas foram acompanhadas por cromatografia de camada delgada (CCD) e extraídas com acetato de etila e cloreto de sódio saturado, concentrada em rotaevaporador rotatório. Posteriormente, os produtos foram purificados por meio de cromatografia em coluna (CC), utilizando sílica como a fase estacionária e hexano/acetato de etila como fase móvel.

3 RESULTADOS e DISCUSSÃO

Por meio dos estudos realizados, o próximo passo consistiu na otimização da melhor condição reacional para a obtenção do produto (3), variando parâmetros como o catalisador, base e solvente (Tabela 1).

Tabela 1 – Otimização das condições reacionais para a síntese do composto (3).

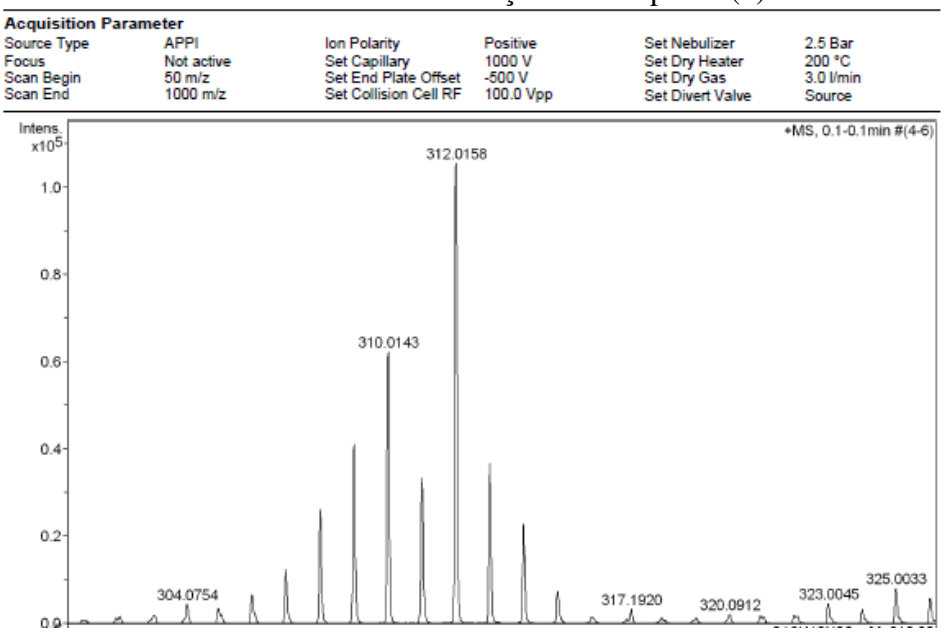


1 2 3

#	Catalisador	Base	Solvente	Rendimento (%)
1	Fe_3O_4	$NaHCO_3$	DMF	65
2	Fe_3O_4	-	DMF	15
3	Fe_2O_3	$NaHCO_3$	DMF	24
4	Fe^0	$NaHCO_3$	DMF	26
5	In^0	$NaHCO_3$	DMF	60
6	CuI	$NaHCO_3$	DMF	44
7	Fe_3O_4	Cs_2CO_3	DMF	32
8	Fe_3O_4	K_2CO_3	DMF	37
9	Fe_3O_4	$NaHCO_3$	DMF	31
10	Fe_3O_4	$NaHCO_3$	Tween 80	-
11	Fe_3O_4	$NaHCO_3$	Glicerol	18

Com a melhor condição reacional estabelecida (Entrada 1), realizou-se uma análise de espectrometria de massas de alta resolução, a qual foi realizada na Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC). Pode-se observar que o pico em 312,0158 corresponde ao peso molecular do composto (3) com 0,96 ppm de erro, confirmando que o produto obtido é de fato o seleneto de di-indoíla. Ademais, observa-se o padrão de distribuição isotópica típico de compostos que contém selênio em sua estrutura (Figura 1).

Figura 1 – Análise de massas de alta resolução do composto (3)



4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A partir dos resultados obtidos, a metodologia mostrou-se satisfatória, apresentando resultados com rendimentos bastante significativos, dados a dificuldade em se realizar reações de ativação C-H em indóis. Cabe salientar também, que este trabalho ainda está em desenvolvimento, uma vez que as próximas etapas deverão ser realizadas variações estruturais dos indóis de modo a se obter uma série de compostos dessa classe de funcionalizados com selênio.

REFERÊNCIAS

AZEREDO, J. B.; GODOI, M.; MARTINS, M. G.; SILVEIRA, C. C.; BRAGA, L. A. A Solvent- and Metal-Free Synthesis of 3-Chacogenyl-indoles Employing DMSO/I2 as an Eco-friendly Catalytic Oxidation System. **The Journal of Organic Chemistry**. Abr. 2014

NOGUEIRA, C. W.; ZENI, G.; ROCHA, J. B. T. **Chemical Review**. 2004, v.104, p.6255.

S. SANTORO, J. B. AZEREDO, V. NASCIMENTO, A. L. BRAGA, L. SANCINETO AND C. SANTI, RSC Adv., **2014**, 4, 31521