

SÍNTESE DE ORGANOCACOGENETOS DE [(3-PENTADECILFENOXI) ALQUIL] DE PENTADECILFENOL USANDO DICALOGENETOS DE DIORANOÍLA E CARDANOL MODIFICADO SINTETICAMENTE

JORGE FRANCO COELHO DIAS¹; JOSÉ SEBASTIÃO SANTOS NETO²;
DIEGO DA SILVA ALVES³; EDER JOÃO LENARDÃO⁴

¹ Universidade Federal de Pelotas – Jorge.franco.coelho.dias@hotmail.com

² Universidade Federal de Pelotas – zeneto.qmc@gmail.com

³ Universidade Federal de Pelotas – diego.alves@ufpel.edu.br

⁴ Universidade Federal de Pelotas – elenardao@uol.com.br

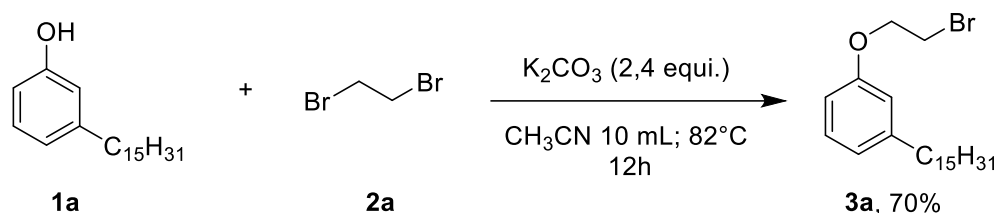
1. INTRODUÇÃO

A síntese de compostos de organosselênio tem atraído atenção nos últimos anos devido às suas interessantes propriedades biológicas¹. Adicionalmente, a modificação de produtos naturais é interessante, pois é uma ferramenta importante para o desenvolvimento de novos produtos com potencial biológico². Além das diversas atividades biológicas dos compostos que ocorrem naturalmente, as porções de éteres modificadas sinteticamente também exibem bioatividades significativas.³

O Cardanol é extraído de casca da castanha de caju, é um subproduto desta extração, sendo ele atóxico, e de fácil manipulação para trabalho. Apesar de ter propriedades biológicas pronunciadas, esse ainda tem o uso nobre pouco explorado.⁴ Já as propriedades farmacológicas dos compostos de selênio já é amplamente relatada.⁵ Assim, o objetivo desse presente trabalho foi a inserção de um grupamento (organosselenil) em uma molécula de origem natural visando aumentar-se assim as propriedades farmacológicas da mesma.

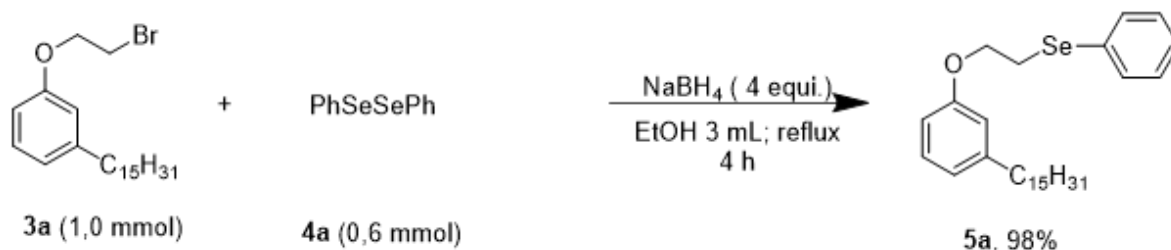
2. METODOLOGIA

Para se chegar ao produto desejado, o trabalho foi realizado em duas etapas: Inicialmente realizou-se a síntese dos 1-(2-bromoetoxil)-3-pentadecilbenzeno (**3a**) para posteriormente reagir com disselenetos de diorganoila. Assim, buscou-se metodologias rápidas e eficientes para sintetizar o substrato **3a**. Para isso, utilizou-se o substrato **1a** (1,0 mmol), com 1,2-dibromoetano **2b** (3,0 equivalentes), K₂CO₃ (2,4 equivalentes) como base e acetonitrila como solvente (10 mL), os quais foram adicionados em um balão de duas bocas de 25,00 mL, e agitação magnética, sob atmosfera de nitrogênio e refluxo. Assim, a reação foi mantida sob a temperatura de 82°C durante um período de 12 horas, obtendo-se o produto desejado **3a** em 70 % de rendimento (Esquema 1).



Esquema 1.

Com o substrato **3a** em mãos e tendo sua estrutura confirmado por análises de massas, RMN 1H e ^{13}C partimos para a síntese do composto **5a** com a seguinte condição: substrato **3a** (1,0 mmol), dicalcogenetos de diorganoíla **4a** (0,6 mmol), $NaBH_4$ (4,0 equivalentes), EtOH como solvente (3,0 mL), os quais foram adicionados em um balão de duas bocas de 25,00 mL, e agitação magnética, sob atmosfera de nitrogênio e munido de condensador de refluxo, sobre um período de 4 h. Após esse período, a reação foi extraída utilizando-se para isso um funil de extração de 50 mL e acetato de etila e água destilada, em que a fase orgânica foi separada, seca com sulfato de magnésio e evaporada sob pressão reduzida. A purificação do produto obtido foi realizada por coluna cromatográfica em sílica gel, utilizando-se como fase móvel uma mistura de hexano/acetato de etila. onde produto **5a** foi obtido com 98% de rendimento. O composto foi identificado por espectrometria de massas (MS) e espectroscopia de ressonância magnética nuclear de hidrogênio e carbono (RMN 1H e RMN ^{13}C) (Esquema 2).



Esquema 2

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Afim de testar a abrangência, limitações e ainda a versatilidade do método desenvolvido começamos a variar o dicalcogenetos de diorganoíla tendo uma serie de **4a** (figura 1). Pode-se observar na figura 2 que foi possível estudar os efeitos eletrônicos e estéricos dos disselenetos de diorganoíla sendo possível obter-se sete compostos inéditos os quais serão testados em breve frente a diferentes propriedades farmacológicas. Quando aos rendimentos obtidos, cabe-se ressaltar que, mesmo quando os produtos foram obtidos em rendimentos baixos, podem ser considerados resultados satisfatórios se levarmos em consideração a complexidade da molécula.

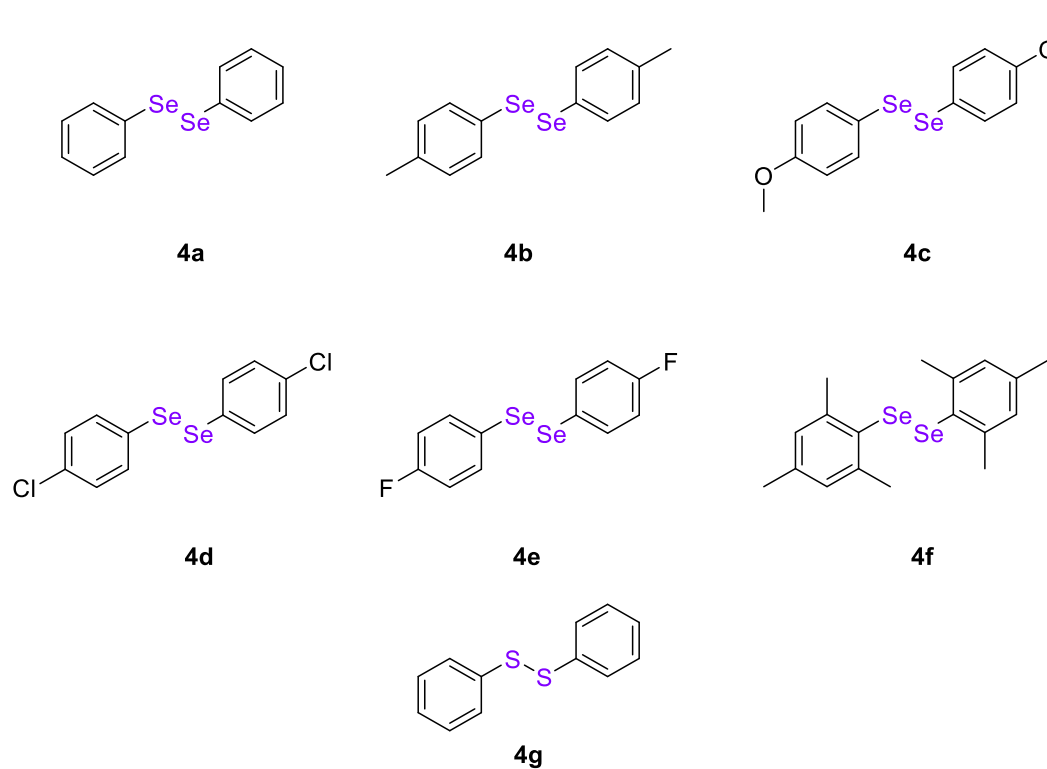


Figura 1: Dicalcogenetos de diorganoíla utilizados.

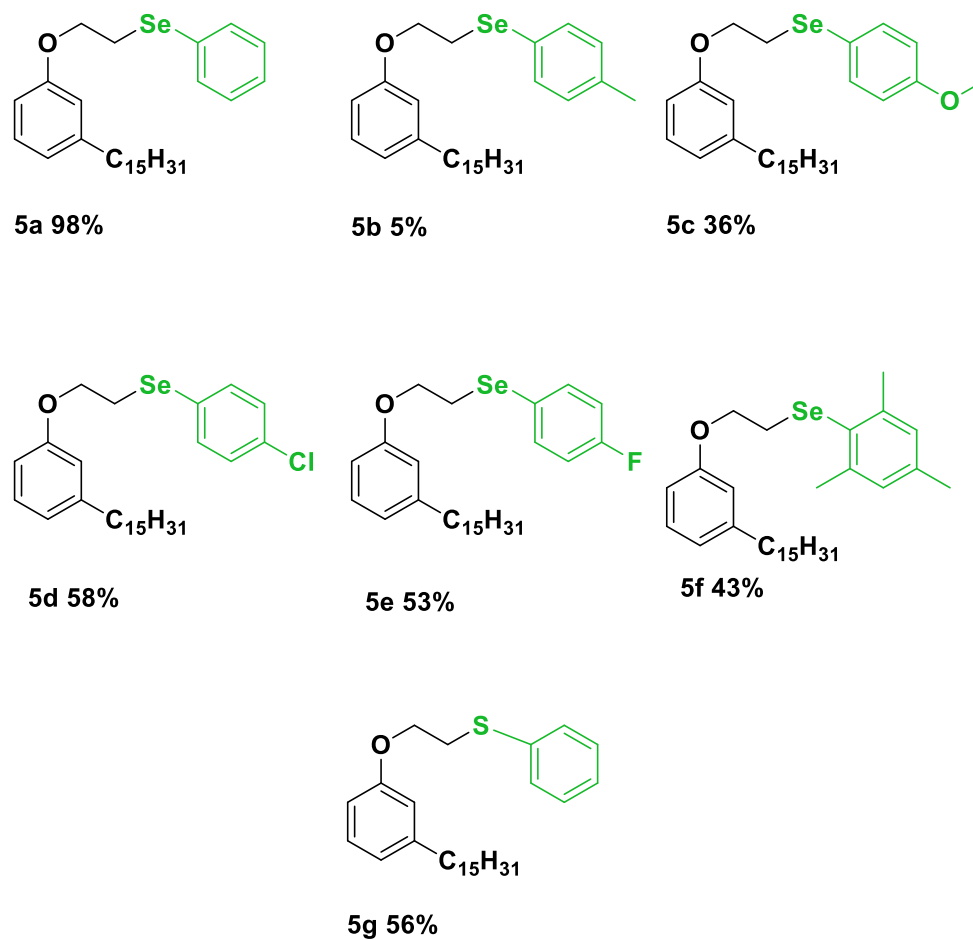


Figura 2: Organocalcogenetos de [2-(3-pentadecilfenoxietila)].



4. CONCLUSÕES

Este trabalho realizado descreve uma estratégia simples e eficiente para a síntese dos oganocacogenetos de [2-(3-pentadecilfenoxietila)] (**4**) com bons rendimentos considerando a complexidade da molécula. É importante salientando que ainda o trabalho está em andamento, e pretendemos ainda expandir o método para outros dicalcogenetos de diorganoíla.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ¹ Patai, S.; Rapoport, Z. em **Chemistry of Functional Groups: Organic Selenium and Tellurium Compounds**, Wiley, Chichester, 2013.
- ² Shen, W. J.; Dodda, R.; Wu, C. C.; Wu, F. I.; Liu, T. H.; Chen, H. H.; Chen, C. H.; Shu, C. F. *Chem. Mater.* **2004**, *16*, 930-934.
- ³ Pati, P. B.; Zade, S. S. *Cryst. Growth Des.* **2014**, *14*, 1695-1700.
- ⁴ (<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC4910563/>)
- ⁵ Nogueira, C. W.; Zeni, G.; Rocha, J. B. T. *Chemical Reviews*, **2004**, *104*, 6255-6286.