

Síntese e caracterização fotofísica de novas cumarinas fluorescentes de Biginelli

Felipe Vitório¹ (PG)*, Thiago M Pereira¹ (IC), Otávio Augusto Chaves² (IC), Aurélio B. B. Ferreira² (PQ), Cedric Stephan Graebin¹ (PQ) e Arthur Eugen Kummerle¹ (PQ).

¹ Laboratório de Diversidade Molecular e Química Medicinal (LadMol-QM), Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, ICE-Departamento de Química, BR 465 Km 07, 23890-000 - Seropédica, RJ, Brasil. ² Laboratório de Fotoquímica Orgânica UFRRJ.

Palavras Chave: Cumarina, Reação Multicomponente.

Introdução

Cumarinas compreendem um grupo de compostos naturais encontrados numa variedade de fontes vegetais e alvo de diversas rotas sintéticas pois possuem propriedades anti-inflamatória, antioxidante, anticâncer, anticoagulantes, etc, possuindo um potencial farmacêutico excelente¹. Outra utilidade está relacionada às características fotofísicas das cumarinas e seus derivados, que possibilita seu uso como filtro solar, lasers de corante e o desenvolvimento de sondas de fluorescência². Em síntese orgânica, a reação multicomponente de Biginelli se destaca por seu protocolo one-pot de fácil execução, onde um aldeído aromático, um composto β-dicarbonílico e uréia são combinados para obtenção de um único produto com em bons rendimentos.³

O objetivo deste trabalho foi a síntese de derivados cumarínicos a partir da reação de Biginelli adaptada a um betacetoéster derivado da 7-dietilaminocumarina, tendo em vista a obtenção de compostos bioativos e que possam ser usados como sondas de fluorescência.

Resultados e Discussão

Em estudos anteriores verificou-se que o uso de pequenas quantidades de HCl 1:2 em etanol para a síntese de derivados cumarínicos de Biginelli permite rendimentos de até 90%³. A reação se procedeu num tudo de 10mL onde foram adicionados 0,3mmol do betacetoéster (1) sintetizado previamente, derivado da 7- Dietilaminocumarina, 0,5mmol de ureia (2), 0,3mmol dos benzaldeídos (3), 12,5 μL de HCl concentrado e etanol como solvente. A reação foi deixada sob aquecimento, com temperatura de 75°C e agitação constante durante 24 horas. Os isolamentos foram feitos por precipitação com água gelada, levando aos produtos desejados em rendimentos de 80-90% (Figura 1).

No espectrômetro de UV-Vis, para o espectro de absorção, foi realizada varredura na faixa de 200 nm a 800 nm de 30 μL (9,90 x 10⁻⁶ mol.L⁻¹) da amostra 4a em um volume de 3 mL de metanol. Para a emissão de fluorescência, foi realizado varredura

entre 400 nm a 800 nm, com a mesma concentração anterior da amostra. A excitação foi feita a 400 nm, a temperatura de 25°C.

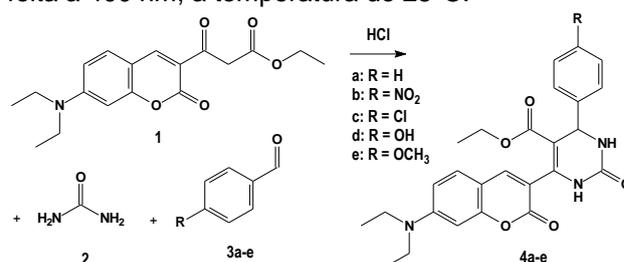


Figura 1. Síntese multicomponente realizada.

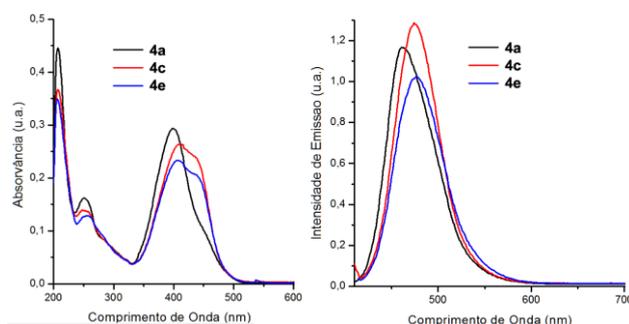


Figura 2. Espectros de absorção no UV-Vis e de emissão de fluorescência (9,9x10⁻⁶ mol.L⁻¹) das amostras 4a, 4c e 4e, em metanol.

Conclusões

A síntese de compostos cumarínicos inéditos através da reação multicomponente de Biginelli é viável, com pequenos ajustes no meio reacional por conta da estrutura da cumarina, levando a bons rendimentos. A série fluorescente apresentada emite a 461nm (4a), 474nm (4c) e 477nm (4e), que não muda consideravelmente com os substituintes. Outros compostos estão sendo sintetizados.

Agradecimentos

CAPES – UFRRJ – FAPERJ

¹Kostova, I.; Bhatia, S.; Grigorov, P.; Balkansky, S.; Parmar, V. S.; Prasad, A. K. e Saso, L. *Curr. Med. Chem.* **2011**, *18*, 3929-3951.

² Kuznetsova, N. A.; Kaliya, O. L. 1992. The photochemistry of coumarins. *Russian Chemical Reviews*, *61*: 683-696.

³ Vitório, F.; Graebin, C. S.; Kummerle, A. E. 2013. 36^o Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química.