

Utilização de glicerol bruto proveniente da transesterificação de óleos vegetais como meio reacional para a síntese de chalcona antifúngica

Teresa B. R. Venancio^{1,*} (IC), Mariana B. Santos¹ (PG), Olavo M. Perrone¹ (PG), Marcelo F. Lima¹ (PQ), Mauricio Boscolo¹(PQ), Ana M. Fusco-Almeida² (PQ), Maria J. S. Mendes-Giannini² (PQ), Luis O. Regasini¹ (PQ) * beatris.venancio@gmail.com

¹Laboratório de Química Verde & Medicinal, Departamento de Química e Ciências Ambientais, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas – Unesp – São José do Rio Preto, São Paulo, Brasil. ²Departamento de Análises Clínicas, Faculdade de Ciências Farmacêuticas, Unesp – Araraquara, São Paulo, Brasil.

Palavras Chave: glicerol, chalcona, antifúngico.

Introdução

O glicerol (ou propano-1,2,3-triol) é uma substância obtida da reação de saponificação e transesterificação de acilglicerídeos naturais.¹ A produção excessiva dessa substância está ligada ao crescimento global da indústria de biodiesel, que o gera como resíduo majoritário, podendo ser refinado e utilizado por outros setores industriais.² O glicerol vem sendo, amplamente, empregado pela Síntese Orgânica devido à sua capacidade de solubilizar compostos orgânicos e inorgânicos, alto ponto de ebulição, pressão de vapor muito baixa e alta estabilidade.³ A baixa toxicidade, alta biodegradabilidade, obtenção a partir de fontes renováveis e suas similaridades físico-químicas com líquidos iônicos podem caracterizar o glicerol como um solvente “verde”.⁴ O presente trabalho objetivou o emprego do glicerol bruto proveniente da transesterificação de diferentes óleos vegetais como meio reacional para a síntese de chalcona (**1**), por meio de condensação aldólica, uma reação conhecida pela sua grande economia de átomos.⁵ O investimento na síntese de **1**, por nosso grupo de pesquisa, pode ser justificada devido suas propriedades antimicrobianas e antiinflamatórias.⁶

Resultados e Discussão

Para obtenção do glicerol bruto, foram utilizados os óleos de; canola, girassol, milho e soja, os quais foram submetidos a reação de transesterificação na presença de EtOH e KOH, a 45 °C por 15 minutos.⁷ A fração glicerol foi analisada por espectroscopia de RMN de ¹H e ¹³C, os quais indicaram a presença dos hidrogênios e carbonos metilênicos em δ_H 3,39 e δ_C 63,5 e hidrogênio e carbono metínico em δ_H 3,50 e δ_C 74,2. As frações de glicerol bruto apresentaram valores de pH compreendidos entre 11 e 12, indicando a presença de etóxido de potássio, o qual foi utilizado como catalisador para a reação de condensação. Para a obtenção de **1**, 10,0 mL de glicerol bruto enriquecido com etóxido de potássio foram utilizados para solubilizar 5 mmol de acetofenona (**2**) e 5 mmol de benzaldeído (**3**) (Figura 1). A reação foi mantida a temperatura ambiente, durante 48 horas. O produto bruto foi submetido a extração líquido-líquido, empregando éter etílico. As

37^ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

análises qualitativas utilizando cromatografia em camada delgada indicaram a obtenção de **1** em quantidades apreciáveis nas diferentes frações de glicerol bruto. Essas reações foram realizadas em triplicatas e em três experimentos independentes.

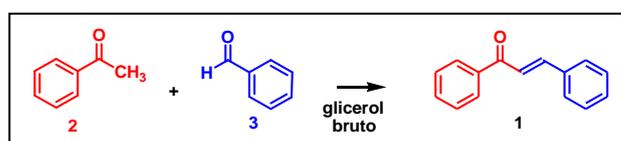


Figura 1. Síntese de Chalcona (**1**)

As análises por CLAE, utilizando coluna de octadecilsilano (C18, 5 μ m), 310 nm, MeOH:H₂O (60→80 de MeOH), 15 minutos, permitiram identificar a presença de **1–3** nos produtos brutos, os quais apresentaram tempos de retenção (em min) de; 13,5, 4,1 e 6,1, respectivamente. As quantificações, utilizando a área da banda de **1**, indicaram que as reações que ocorreram no glicerol bruto do óleo de canola mostrou-se mais eficiente que as demais, indicando um teor de 93–95 %. A chalcona **1** foi submetida aos ensaios de atividade biológica contra fungos dos gêneros *Candida* e *Cryptococcus*, exibindo potência superior ao fluconazol, antifúngico utilizado como referência.

Conclusões

O presente trabalho corroborou a elevada eficiência do glicerol como solvente reacional, mesmo que empregado na sua forma bruta. Contudo, foram observadas diferenças entre o glicerol bruto proveniente de diferentes óleos vegetais na reação de condensação aldólica. As análises de bioatividade indicaram alta potência antifúngica de **1**.

Agradecimentos

PROAP-Unesp e PROPe-Unesp

- 1 Pagliaro, M. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, *46*, 4434.
- 2 Corma, A.; Iborra, S. e Velty, A. *Chem. Rev.* **2007**, *107*, 2411.
- 3 Gu, Y.; Barrault, J. e Jérôme, F. *Adv. Synth. Catal.* **2008**, *350*, 2007
- 4 Wolfson, A.; Dlugy C. Shotland, Y. *Environ. Chem. Lett.* **2007**, *5*, 67.
- 5 Mestres, R. *Green Chem.* **2004**, *6*, 583.
- 6 Nowakowska, Z. *Eur. J. Med. Chem.* **2007**, *42*, 125.
- 7 Geris, R. et al. *Quim. Nova* **2007**, *30*, 1369.