

Síntese de 6,8-bis(fenilselenil)crisinas promovida por Ultrassom

Nathalia B. Padilha¹ (IC), Sergio F. Fonseca¹ (PG), Juliano A. Rohers¹ (PG), Eder J. Lenardão¹ (PQ)*

¹ Centro de Ciências Químicas Farmacêuticas e de Alimentos – LASOL – UFPel – 96010-900 – Pelotas, RS

*elenardao@uol.com.br ¹nathaliapadilha@gmail.com

Palavras Chave: Ultrassom; Crisina; Selênio

Abstract

Synthesis of 6,8-bis(phenylselenyl)chrysin promoted by Ultrasound.

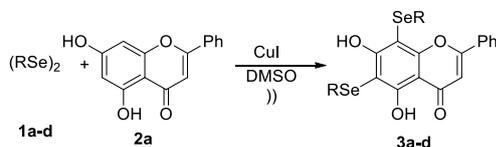
Several selenium-containing chrysin derivatives were synthesized using diphenyl diselenide and copper-catalysis in DMSO and under ultrasonic irradiation.

Introdução

A crisina é um flavonoide que pode ser encontrado em diferentes frutas e hortaliças e apresenta muitas atividades biológicas como efeito antioxidante, anti-inflamatório e, recentemente, têm-se estudado seu potencial anticancerígeno.¹ O número de estudos envolvendo a adição de grupos organocalcogênicos em compostos naturais vem crescendo exponencialmente.² A inserção destes grupos vêm se destacando por potencializar as atividades biológicas, como antioxidantes e antimicrobiais.³ Neste sentido, o objetivo deste trabalho foi estudar a síntese de 6,8-bis(fenilselenil)crisinas, visando à preparação de novas moléculas bioativas contendo selênio.

Resultados e Discussão

Disseleneto de difenila (**1a**, 0,75 mmol) e crisina (**2a**, 0,5 mmol) foram utilizados para estabelecer as melhores condições reacionais para a obtenção das 6,8-bis(fenilselenil)crisinas (Esquema 1). Utilizando DMSO como solvente (2 mL), CuI como catalisador (30 mol%), a 120 °C em sistema convencional, obteve-se o produto **3a** (R = C₆H₅) em 24h com 76% de rendimento.



Esquema 1: Esquema reacional.

Variando-se a quantidade de catalisador observou-se que o rendimento foi de 87% ao utilizar 5 mol% de CuI, e sem a utilização do mesmo, não houve formação do produto. Testou-se DMF, dioxano, tolueno e acetonitrila como solventes, porém, somente com DMF houve formação do produto (20% de rendimento), definindo-se assim DMSO como solvente ideal. Diferentes catalisadores de cobre também foram testados (Cu NPS, CuCl, CuBr e Cu(OAc)₂). No entanto, os resultados foram inferiores aos obtidos com CuI. Ao utilizar

temperaturas de 100 e 80 °C, notou-se um significativo decréscimo do rendimento (52% e 18% respectivamente), o que demonstra a importância da temperatura na reação. Após definidas as melhores condições reacionais usando aquecimento convencional (banho de óleo), testou-se a utilização de irradiação de microondas (MO) e ultrassom (US), com o objetivo de reduzir o tempo reacional. O produto desejado **3a** foi obtido em 2,5 e 3 h de reação e 80% (MO) e 89% (US) de rendimento. Definiu-se então que a irradiação de ultrassom pode ser uma alternativa eficiente ao aquecimento convencional.

A fim de variar o escopo da reação, utilizou-se outros disselenetos de diarila, contendo grupos de doadores e retiradores de elétrons (Figura 1).

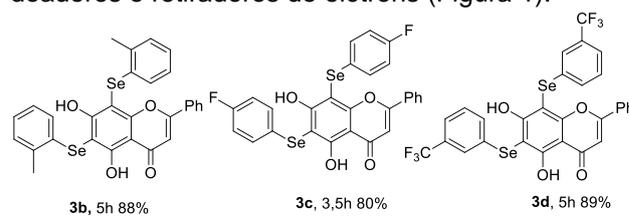


Figura 1: Variação do escopo reacional.

Os resultados obtidos mostram a tolerância da metodologia desenvolvida tanto com a presença de grupos retiradores quanto doadores de elétrons na estrutura do disseleneto. Após 5 h de reação, foram obtidos os produtos disselenilados **3b-d** em 88, 80 e 89% de rendimento, respectivamente.

Conclusões

Foi possível realizar a síntese dos compostos inéditos **3a-d** de forma rápida e eficaz através do uso de irradiação de US e catálise com CuI. Posteriormente testes biológicos serão realizados a fim de estudar a atividade farmacológica e bactericida dos novos compostos.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e FAPERGS

¹Chakraborty, S.; Basu, S.; Lahiri, A.; Basak, S. *Journal of Molecular Structure*. **2010**, 977, 180. ²Davies, H. M. L. *Nature*. **2009**, 459, 786. ³Lenardão, E. J.; Silva, W. P.; Jacob, R. G.; Maia, D. S. V.; Goldbeck, J. C.; Fonseca, S.F. Semi-synthetic compounds as antimicrobial agents in food preservation. In: A. Méndez-Vilas. (Org.). *The Battle Against Microbial Pathogens: Basic Science, Technological Advances and Educational Programs*. 5ed; Formatex Research Center: Badajoz, 2015; p. 576-583