

Síntese de Cumarinas: Análise Quantitativa de Rendimento da Hidroarilação de Propiolatos com Fenóis

Rodrigo Freitas da Silva Alvarenga, Diego Rangel Cardoso Silva, Rodrigo Rodrigues de Oliveira

Os produtos naturais vêm despertando o interesse de pesquisadores pela sua diversidade estrutural, relacionada a inúmeras atividades biológicas e farmacológicas. Dentre as classes de produtos naturais, as cumarinas são de grande interesse para a indústria farmacêutica atuando como anticancerígenos, antivirais, anti-hipertensiva e principalmente como atividade antimicrobiana. As cumarinas são substâncias orgânicas que pertencem à classe dos derivados benzopirona, formadas por um anel benzeno acoplada a um anel pirona. Sua síntese pode ser realizada por meio de uma hidroarilação de um ácido carboxílico ou éster contendo um grupo α -etilino, utilizando fenóis em presença de $ZnCl_2$. O mecanismo de reação pode ser explicado pela substituição eletrofílica devido ao ataque dos elétrons π do anel aromático ao carbono metínico terminal do reagente. Esse último é ativado pela presença do sal de zinco que se coordena com os oxigênios da hidroxila do fenol e da carbonila do reagente. Nas etapas seguintes, ocorre ciclização do anel lactona pelo ataque da hidroxila *orto* do anel, levando à formação da estrutura cumarínica. Essa reação promove a obtenção de cumarinas sem substituinte na posição 3 e 4 do esqueleto cumárico. Esse trabalho tem como objetivo analisar a reatividade de diferentes fenóis em uma variação da reação de Pechman, utilizando o propiolato de etila ou o ácido propinoico em presença de $ZnCl_2$. O procedimento sintético para essas reações foi padronizado e os produtos reacionais obtidos foram analisados por cromatógrafo gasoso acoplado ao espectrômetro de massa (CG/MS). Os rendimentos de cada reação foram calculados pela curva padrão construída com diferentes concentrações de uma solução padrão metanólica de cumarina. Os resultados obtidos mostraram diferentes rendimentos de acordo com o fenol utilizado (valores que variam de 87% para o 5-metoxiresorcinol a 20% para o pirogalol), o que sugere diferentes reatividades para cada fenol utilizado.

Palavras-chave: Síntese Orgânica, Cumarinas, Reação de Pechman.

Instituição de fomento: UENF