Química

Reatividade de chalconas monosubstituídas frente a reações de adição conjugada: um estudo teórico

Danilo Forti Carvalho de Benedicto - 9° módulo de Química, UFLA

Sérgio Scherrer Thomasi - Orientador DQI, UFLA - Orientador(a)

Resumo

As chalconas (1,3-difenil-2-propen-1-onas) são compostos orgânicos naturais pertencentes à classe dos flavonóides e atuam como precursores na biossíntese de metabólitos secundários de plantas, como outros flavonóides e isoflavonóides e também como pigmentos em certas espécies de flores. Muitos estudos têm demonstrado o potencial das chalconas e seus derivados como agentes antibacterianos, antitumorais, antimaláricos, antioxidantes, anti-inflamatórios, entre outros, o que motiva o interesse pela compreensão de suas propriedades químicas. A estrutura básica das chalconas consiste em dois anéis aromáticos unidos por uma cadeia alifática de três carbonos, que contém uma cetona alfa-beta insaturada. Esse sistema carbonílico alfa-beta insaturado consiste num aceptor de Michael e tem sido apontado como a possível origem estrutural da grande diversidade de efeitos biológicos que as chalconas apresentam. Nesse sentido, o presente trabalho teve como objetivo a avaliação do efeito de grupos substituintes na reatividade da carbonila alfa-beta insaturada de um conjunto de 16 chalconas monosubstituídas frente a reações de adição conjugada. Para isso, foram obtidos espectros simulados de RMN (espectroscopia de ressonância magnética nuclear) de H-1 e C-13 para cada um dos compostos investigados. Os espectros simulados foram obtidos pelo programa NMR Simulator, desenvolvido em parceria pelas Universidades de Cali e Bogotá (Colômbia) e Escola Politécnica Federal de Lausanne (Suíça). Os espectros foram realizados simulando uma frequência de 400 MHz e 64000 pontos. Os espectros de H-1 foram obtidos no intervalo de 0 a 11 ppm com espessura de linha de 1 Hz, já os espectros de C-13 foram obtidos no intervalo de 0 a 240 ppm com espessura de linha de 10 Hz. Pelos dados espectroscópicos de deslocamento químico foi possível constatar que a presença de grupos substituintes na posição orto dos anéis aromáticos é capaz de alterar a blindagem diamagnética sobre os átomos de hidrogênio e carbono nas posições alfa e beta com relação à carbonila, bem como sobre o carbono carbonílico, o que interfere na eletrofilicidade dos carbonos do sistema e o torna mais ou menos reativo frente à adição de um nucleófilo. Estudos teóricos como este possibilitam a análise de uma grande quantidade de compostos em um tempo relativamente curto e com custo extremamente baixo, além de terem o potencial de orientar futuros trabalhos experimentais na área.

Palavras-Chave: Chalconas, Espectros de RMN simulados, Aceptores de Michael.
Link do pitch: https://youtu.be/I9NHBu7Z7hg