

SÍNTESE, MODIFICAÇÃO ESTRUTURAL, REATIVIDADE E AVALIAÇÃO BIOLÓGICA DE COMPOSTOS DERIVADOS DA MALEIMIDA

SOBRAL, Adrielli Tábata¹ (adrielli_sobral@hotmail.com); **SOUZA, Marciéli Karoline Rodrigues**² (marciellikaroline@hotmail.com); **SILVEIRA, Ingridhy Ostaciana Maia Freitas**³ (ziim@hotmail.com); **GOMES, Roberto da Silva**⁴ (robertogomes@ufgd.edu.br).

¹Discente do curso de Química – Licenciatura e Bacharelado/UFGD; PIBIC/UFGD

²Discente do curso de Química – Licenciatura e Bacharelado/UFGD; PIBIC/UFGD

³Docente/Pesquisador – FACET/UFGD.

⁴Docente/Pesquisador – FACET/UFGD.

A importância do estudo da estrutura molecular e reatividade de compostos orgânicos vêm de avanços na química orgânica que levaram a novos métodos e estratégias de síntese química, que por sua vez ensinam como preparar as substâncias, mesmo quando raras, e em muitos casos, até a preparação de compostos não existentes. A utilização de análises computacionais não necessita de dados experimentais, entretanto, quando aliados a estes resultados fornecem uma grande ferramenta para o entendimento da estrutura molecular e da reatividade dos compostos orgânicos. Dessa forma, foram propostas reações de adição de tio-Michael a compostos carbonílicos α , β , insaturados, derivados do ácido *N*-aril maleâmico, utilizando-os como blocos de construção sintética para posteriormente metanólise em meio ácido, básico e enzimático, produzindo precursores de interesse biológico. Este trabalho aliou os resultados experimentais das metanólises às análises conformacionais, retirados de cálculos teórico-computacionais, para compreender a seletividade destas reações. O resultado experimental, no caso da metanólise em meio ácido formam diésteres como produtos, já nos meios básico e enzimático, são formados dois ésteres isômeros, onde preferencialmente é formado aquele cujo ataque nucleofílico ocorre no carbono carbonílico α ao enxofre. Os cálculos teóricos no nível de teoria B3LYP/6-31⁺⁺G indicaram evidências que corroboram com os resultados experimentais, mostrando que o ataque nucleofílico ocorre preferencialmente no carbono que possui um contato curto com o enxofre relacionado a uma atração de efeito atrativo menor que a soma dos raios de van der Waals. Para o desenvolvimento do projeto foram realizadas as reações de formação dos dienófilos, que apresentaram bons rendimentos. Todos os compostos sintetizados na primeira etapa deste projeto foram purificados e caracterizados tendo suas estruturas confirmadas. As maleimidas sintetizadas foram testadas contra as bactérias multirresistentes *Staphylococcus aureus*, *Streptococcus pneumoniae*, *Pseudomonas* sp., *Escherichia coli*, *Shigella* sp., *Salmonella* sp., *Neisseria gonorrhoeae* e o fungo *Candida Kruzei*, não havendo atividade contra as bactérias testadas, apenas contra o fungo, sendo o composto 9 o que apresentou melhor resultado (MIC= 10,8 μ g/mL). Reações de Diels-Alder sem catalisador quiral só ocorrem com ciclopentadieno, apresentando altos rendimentos. Produtos de Diels-Alder, com tiofeno e pirrol, sem catalisador quiral não são formados em condições brandas.

Palavras-chave: Diel-Alder. Maleimida. *N*-Arl imidas.

Agradecimentos: UFGD, UEMS, CAPES, CNPq, Fundect.