

## **Síntese orientada pela diversidade estrutural (DOS) empregando o aduto de Diels-Alder triciclo[6.2.1.0<sup>2,7</sup>]undeca-4,9-dien-3,6-diona como material de partida**

**Mestrando:** David Monteiro de Souza Junior

**Orientador:** Adilson Beatriz

**Co-orientador:** *Jamal Rafique Khan*

### **RESUMO**

A síntese orgânica é a ciência que se ocupa do projeto e construção de novas moléculas a partir de estruturas mais simples. Friedrich Wöhler (1800 – 1882) em 1828 conseguiu a síntese racional da ureia, emergindo, assim, a química orgânica sintética como uma nova área de interesse químico. Os químicos orgânicos sintéticos propuseram no início, a construção de substâncias orgânicas com estruturas análogas a dos produtos naturais ou a síntese parcial desses compostos. Robert Burns Woodward e William von Eggers Doering, em 1944, levaram por meio síntese do quinina, a síntese orgânica a outro patamar. Após a segunda guerra mundial E. J. Corey, sistematizou uma sequência de regras chamada de análise retrossintética, para auxiliar no planejamento da síntese de compostos orgânicos. As primeiras substâncias utilizadas no tratamento de doenças eram as extraídas de produtos naturais ou obtidas por processos fermentativos. Com o desenvolvimento do conhecimento sobre síntese orgânica e o maior delineamento dos mecanismos de ação biológicos, a síntese racional ganhou espaço nas pesquisas da química medicinal mundo a fora. Na busca por substâncias orgânicas biologicamente ativas, a diversidade estrutural e complexidade molecular são parâmetros moduladores para o trabalho do químico orgânico sintético. A fim de atingir este objetivo de produzir moléculas com diversidade estrutural, Stuart Schreiber, em 2000, propôs o desenvolvimento de novas regras de análise sintética direta para delinear a estratégia de síntese objetivando maior complexidade, diversidade e eficiência na síntese de novos produtos, que ficou conhecida como síntese orientada pela diversidade estrutural (DOS, sigla em inglês). No presente trabalho objetivamos aplicar os princípios da DOS. A estratégia escolhida é a ramificação dos caminhos sintéticos, para produzir novos esqueletos moleculares, preenchendo o maior espaço químico possível. Esta estratégia consiste no uso de um substrato comum frente a diferentes reagentes. Utilizando compostos polifuncionais ou com grupos funcionais que realizam diversas reações. O substrato utilizado neste projeto é o cicloaduto altamente funcionalizado produto de uma reação de Diels-Alder clássica entre ciclopentadieno (dieno conjugado) e a *para*-benzoquinona (dienófilo com grupo retirador de densidade eletrônica – EWG). Resultando em vantagens como economia de átomos (conceito de Trost), complexidade estrutural (conceito de Wender) e com a criação de novas ligações  $\sigma$  (conceito de Hendrickson).

**Palavras chave:** DOS, Síntese, Diversidade, Diels-Alder.

