



SÍNTESE E AVALIAÇÃO “IN SÍLICO” DO HETEROCICLO 2-(4-CLOROFENIL)-1,3-BENZOTIAZOL

Possamai T. W.; Buzzi F. C.

*Centro de Ciências da Saúde, Universidade do Vale do Itajaí, SC, Brasil.
thairinne.wp@hotmail.com

Introdução: O método de descoberta de fármacos baseado na síntese de fragmentos bioativos que possam ser derivatizados pode contribuir de maneira ímpar na descoberta de novas substâncias bioativas, passíveis de representarem autênticas entidades químicas inovadoras, de possível aplicação terapêutica cada vez mais desejada pela indústria farmacêutica. Entre estes fragmentos, o heterociclo benzotiazol apresenta inúmeras atividades biológicas já comprovadas. Desta forma, o objetivo deste trabalho foi sintetizar o heterociclo 2-(4-clorofenil)-1,3-benzotiazol e avaliar o potencial de aplicabilidade terapêutica “in silico” utilizando diferentes estratégias computacionais. **Métodos:** O composto foi sintetizado segundo uma rota predefinida a partir do reagente 2-aminotiofenol e o 4-clorobenzaldeído sob refluxo e recristalizado em metanol. A obtenção do produto desejado foi acompanhada por cromatografia em camada delgada, e posteriormente identificado por espectroscopia de ressonância magnética nuclear de próton e carbono. A avaliação “in silico” foi realizada no programa *FreeMolinspiration online* através do JME Editor, para a predição quanto aos parâmetros de Lipinski e outras extensões. **Resultados:** Na síntese do composto foram avaliados dois tempos reacionais de 1h30 e 3h, para os quais obteve-se os rendimentos de 74,1% e 73,1% respectivamente, observando-se que o aumento do tempo reacional não aumentou o rendimento da reação. O espectro de RMN- H^1 confirma a estrutura proposta no qual observa-se dois duplos dupletos em 8,02 e 7,46 ppm com $J=8,7\text{Hz}$ referentes aos hidrogênios do anel para substituído e na região de 8,07 a 7,36 ppm encontram-se os sinais referentes aos hidrogênios do anel aromático do benzotiazol. No espectro de RMN- ^{13}C observa-se os sinais em 166,6 ppm do carbono ligado ao nitrogênio da porção tiazol, em 121,7 ppm o carbono ligado ao substituinte cloro e na região de 137,0 a 121,7 ppm 9 sinais dos carbonos aromáticos. Realizou-se a avaliação dos parâmetros de Lipinski, que demonstrou um log de P igual a 4,97, um valor da massa molar igual a 245,73 g/mol, número de aceptores de hidrogênio igual a 1 e doadores de ligação de hidrogênio igual a 0. Além destes foram também avaliados o TPSA com um valor de 12,89, volume molar de 199,53 e número de ligações rotacionais igual a 1. **Conclusão:** O 2-(4-clorofenil)-1,3-benzotiazol foi sintetizado com bom rendimento reacional, no menor tempo avaliado e identificado por métodos espectroscópicos. A avaliação “in silico” demonstrou que o fragmento não viola as regras de Lipinski, e apresenta bons resultados nos demais parâmetros podendo ser utilizado para derivações na busca de novos fármacos.

Apoio financeiro/Agradecimentos: Art. 170, UNIVALI.