



APLICABILIDADE DO CLORETO DE COBALTO (CoCl_2) NA CATÁLISE HOMOGÊNEA DA REAÇÃO DE ALILAÇÃO

Sara Ingrid Medeiros de Aquino¹, Juliano Carlo Rufino de Freitas²

RESUMO

Dentre as várias reações que visam a construção de novas ligações carbono-carbono, uma que merece destaque é a reação de alilação. O principal produto da reação de alilação é o álcool homoalílico, um importante intermediário sintético na preparação de compostos biologicamente ativos. A literatura descreve inúmeros métodos de alilação de compostos carbonílicos, no entanto, pouco possibilitam a realização dessa reação em meio aquoso sob atmosfera aberta. Tendo em vista isto, o presente trabalho teve como objetivo desenvolver um novo método para a síntese de álcoois homoalílicos a partir a alilação aldeídos por aliltrifluoroborato de potássio, catalisada por cloreto de cobalto (CoCl_2), bem como avaliar a toxicidade desses compostos frente a larvas de *Artemia salina* Leach. Diferentes parâmetros foram avaliados e os álcoois homoalílicos obtidos foram caracterizados por ressonância magnética nuclear. Como resultado os álcoois homoalílicos foram obtidos com rendimentos que variaram de 87 a 93%. Para o teste toxicológico frente as larvas da *Artemia salina* foi escolhido o 1-(4-nitrofenil)-but-3-en-1-ol, o qual apresentou uma DL_{50} de 143,16 $\mu\text{g/mL}$, calculada pelo *software* POLO-PC, indicando uma moderada toxicidade. Em suma, o método desenvolvido para sintetize dos álcoois homoalílicos foi considerado eficiente e outros estudos biológicos estão em andamento.

Palavras-chave: Catálise Química, Álcool homoalílico, Avaliação toxicológica.

¹Aluna do curso de Farmácia, Centro de Educação e Saúde, UFCG, Cuité, PB, e-mail: sara.ingrid@estudante.ufcg.edu.br

²Doutora em Química, Professor Associado, Centro de Educação e Saúde, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: julianocrf@gmail.com

APPLICABILITY OF COBALT CHLORIDE (CoCl₂) IN THE HOMOGENEOUS CATALYSIS OF THE ALLYLATION REACTION.

ABSTRACT

Among the various reactions aimed at building new carbon-carbon bonds, one that deserves to be highlighted is the allylation reaction. The main product of the allylation reaction is homoallylic alcohol, an important synthetic intermediate in the preparation of biologically active compounds. The literature describes numerous methods for evaluating carbonyl compounds, however, they do not make it possible to carry out this reaction in an aqueous medium under an open atmosphere. In view of this, the present work aimed to develop a new method for the synthesis of homoallylic alcohols from the allylation of aldehydes by potassium allyl trifluoroborate, catalyzed by cobalt chloride (CoCl₂), as well as to evaluate the toxicity of these compounds against larvae of *Artemia salina* Leach. Different parameters were evaluated and the homoallylic alcohols obtained were characterized by nuclear magnetic resonance. As a result, homoallylic alcohols were obtained with yields ranging from 87 to 93%. For the toxicological test against the *Artemia salina* larvae, 1-(4-nitrophenyl)-but-3-en-1-ol was chosen, which presented a LD₅₀ of 143.16 µg/mL, calculated by the POLO-PC software, indicating moderate toxicity. In short, the method developed to synthesize homoallylic alcohols was considered efficient and other biological studies are ongoing.

Keywords: Chemical Catalysis, Homoallylic Alcohol, Toxicological Evaluation.