

jornadas

departamento de química



2013

livro de resumos

21 maio 2013 ■ ■ clav ■ anf. 4 ■

<b>P.20</b>	P. D. Santos, A. M. Canto, L. M.. Loura <b><i>Molecular dynamic study of pyrene in palmitoylsphingomyelin/cholesterol bilayers</i></b>	<b>50</b>
<b>P.21</b>	P. Tropecêlo, A.J. Carvalho, P.J. Mendes <b><i>DFT Studies on the Hyperpolarizabilities of Organometallic Complexes Containing Nitrile Thienyl Derived Ligands</i></b>	<b>51</b>
<b>P.22</b>	T.J. Silva, P.J. Mendes, J. P. Ramalho, A. J. Carvalho, M. H. Garcia, J. Heck <b><i>DFT Conformational Studies on Ruthenium (II) Complexes: Dependence of the First Hyperpolarizability with Planarity of the Conjugated System</i></b>	<b>52</b>
<b>P.23</b>	T.J. Silva, P.J. Mendes, M. H. Garcia, J. Heck <b><i>Hiperpolarizabilidades Quadráticas de Acetiletos Metálicos Contendo Derivados Nitrotiofénicos</i></b>	<b>53</b>
<b>P.24</b>	P.J. Mendes, A.M. Santos, M.H. Garcia, M.P. Robalo, T.J. Silva <b><i>Compostos Organometálicos Contendo Derivados de Tieno[3,2-b]tiofeno com Potencial Comutação das Propriedades de Óptica Não Linear</i></b>	<b>54</b>
<b>P.25</b>	S.S. Afonso, A.P. Teixeira, M.R. Martins, F.C. Teixeira <b><i>Síntese de ácidos e ésteres mono- e bisfósónicos derivados do indazole</i></b>	<b>55</b>
<b>P.26</b>	J L. Alves, P. Barrulas, A.T. Caldeira, A.J. Burke <b><i>Synthesis and Evaluation of Epicinchonine-Triazole Derivatives</i></b>	<b>56</b>
<b>P.27</b>	S.M. Martins, J. Maçaira, L. Andrade, A. Mendes, P. Branco, A. Pereira <b><i>Esculetin-based Organic Chromophores for Dye Sensitized Solar Cells</i></b>	<b>57</b>
<b>P.28</b>	R.V. Perrella, D.P. Santos, S.J. Ribeiro, M.A. Schiavon, J.L. Ferrari <b><i>Er<sup>3+</sup>-doped Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> obtained by polymeric precursor: Decomposition, Structural and Upconversion emission properties</i></b>	<b>58</b>
<b>P.29</b>	M. Caiado, C.S. Caetano, J.E. Castanheiro <b><i>Esterification of free fatty acids over chitosan with sulfonic groups</i></b>	<b>59</b>
<b>P.30</b>	M.C. Parreira, J.P. Ramalho, A.J. Carvalho, L.F. Martins <b><i>Diffusion coefficients of chlorophnols and water by computer simulation</i></b>	<b>60</b>
<b>P.31</b>	M. Simões, N. Martins, M.J. Cabrita, A.J. Burke, R. Garcia <b><i>Polímeros Molecularmente Impressos (MIPs) como adsorventes para extracção em fase sólida: síntese, caracterização química e morfológica</i></b>	<b>61</b>
<b>P.32</b>	M.M. Carrott, I.P. Cansado, P.A. Russo, P.J. Carrott, C. Catrinescu, P. Castilho, C. Fernandes, C. Breen <b><i>Catalisadores derivados de uma argila do Porto Santo: efeito da ativação ácida na porosidade</i></b>	<b>62</b>
<b>P.33</b>	P.A. Mourão, I.P. Cansado, M.M. Carrott, P.J. Carrott <b><i>Adsorption of MCPA on different activated carbons</i></b>	<b>63</b>

## Síntese de ácidos e ésteres mono- e bisfosfónicos derivados do indazole

S.S. Afonso<sup>1</sup>, A.P. Teixeira<sup>1</sup>, M.R. Martins<sup>2</sup>, F.C. Teixeira<sup>3</sup>

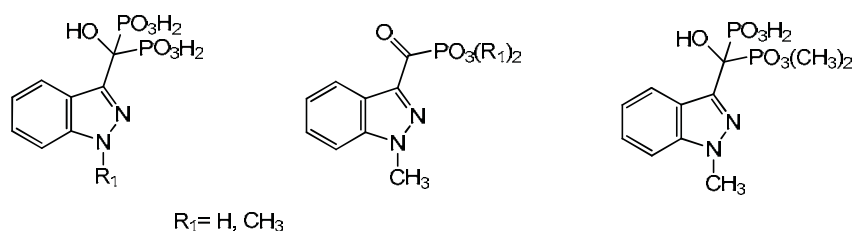
<sup>1</sup>Centro de Química de Évora & Departamento de Química da ECTUE, <sup>2</sup>ICAAM & Departamento de Química da ECTUE, <sup>3</sup>Laboratório Nacional de Energia e Geologia (LNEG), Estrada do Paço do Lumiar, 22, 1649-038 Lisboa  
silvania\_ssb@hotmail.com

Os bisfosfonatos (BPs) constituem um grupo de compostos derivados do ácido bisfosfónico e dos seus sais, onde o grupo P-O-P foi substituído por um bioisoster, resultando na estrutura P-C-P, que lhe confere maior estabilidade química e metabólica.

Os bisfosfonatos (BPs) constituem uma classe importante de fármacos, com aplicações terapêuticas no tratamento de doenças do metabolismo mineral do osso, como a osteoporose e a doença de Paget. Estes compostos também têm mostrado atividade em outras áreas, como o demonstram os estudos sobre a atividade antitumoral de bisfosfonatos ao nível das metástases ósseas, e no cancro da próstata e da mama, e também atividade antiparasitária, nomeadamente contra diversos microrganismos e protozoários, incluindo o *Trypanosoma cruzi* e o *Plasmodium falciparum*. [1-4]

A utilização destes compostos na terapêutica é dificultada pela sua reduzida biodisponibilidade por via oral devida à baixa lipofilicidade e à presença de cargas a pH fisiológico. A melhoria das suas propriedades farmacocinéticas pode ser obtida pela utilização dos derivados ésteres como pró-fármacos. [5]

Neste trabalho apresenta-se a síntese e caracterização de diversos derivados do indazole com grupos ácidos mono- e bisfosfónicos, com grupos ésteres metílicos e ainda com um grupo ácido e um éster. Estes compostos serão submetidos a diversos estudos para avaliação das suas propriedades antioxidantes, toxicológicas e antimicrobianas.



[1] H. Fleisch, *Bisphosphonates in Bone Disease: from the Lab to Patient*, 4th ed., Academic Press, San Diego, 2000.

[2] R. Bartl, B. Frisch, E. von Tresckow, C. Bartl, *Bisphosphonates in Medical Practice*, Springer-Verlag, Heidelberg, 2007.

[3] S. Zhang, G. Gangal, H. Uludag, *Chem. Soc. Rev.*, 36 (2007), 507.

[4] M. B. Martin, J.S. Grimley, J. C. Lewis, H. T. Heath, B. N. Bailey, H. Kendrick, V. Yardley, A. Caldera, R. Lira, J.A. Urbina, S. N. Moreno, R. Docampo, S. T. Croft, E. Oldfield, *J. Med. Chem.*, 44 (2001), 909.

[5] A. Ezra, G. Golomb, *Adv. Drug Deliv. Rev.*, 42 (2000), 175.

**Agradecimentos:** À FCT (FEDER, POCI) pelo financiamento concedido (POCI/QUI/55508/2004 e PPCDT/QUI/55508/2004), financiamento plurianual do CQE e à Rede Nacional de RMN (IST-UTL) pela utilização dos equipamentos de RMN.