

## Emprego de Benzil na Obtenção de N-Heterociclos Funcionalizados Utilizando Microondas.

Mara E. F. Braibante<sup>1</sup>(PQ), Hugo T. S. Braibante<sup>1</sup>(PQ), Carla C. Costa<sup>1</sup>(PG), Marciana P. Uliana<sup>1</sup> (PG), Alessandro D. Bortolotto<sup>1</sup> (IC), Marcelo Spennazzatto<sup>1</sup> (IC).

mar@quimica.ufsm.br

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), 97105-900, Santa Maria-RS-Brasil

Palavras Chave: heterociclos, benzil e dinucleófilos.

### Introdução

A obtenção de compostos heterocíclicos vem se caracterizando como um importante campo de investigação dentro da química orgânica sendo de grande interesse de químicos, bioquímicos e biólogos devido a presença destes compostos na natureza e suas interações no metabolismo de organismos vivos desempenhando várias funções bioquímicas encontrando uma vasta aplicação graças as suas propriedades. A literatura cita o emprego dos dieletrófilos glicoxal (HCOCOH) e fenil glicoxal (HCOCOPh) com C,N dinucleófilos na obtenção de compostos heterocíclicos do tipo 2-pirrolinona.<sup>1</sup> Neste trabalho descrevemos a obtenção de heterociclos empregando o dieletrófilo benzil (PhCOCOPh) utilizando N,C-dinucleófilo  $\beta$ -enamino carbonílico **2** e N,N-dinucleófilos semicarbazida **3** e tiosemicarbazida **4** empregando energia de microondas.

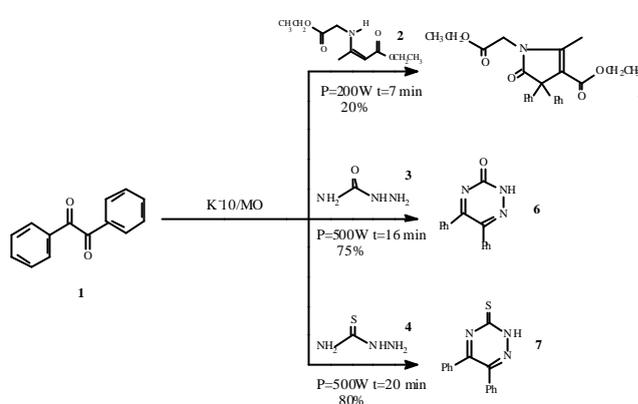
### Resultados e Discussão

Com o intuito de obter compostos N-heterociclos avaliou-se a reatividade do dieletrófilo benzil **1** com diferentes dinucleófilos

O heterociclo **5** (Esquema 1) foi obtido a partir da reação entre o N,C-dinucleófilo  $\beta$ -enamino carbonílico **2** (derivado da glicina) e o dieletrófilo benzil **1**. Nesta reação observamos inicialmente o ataque nucleofílico do átomo do nitrogênio do dinucleófilo seguido do ataque do átomo de carbono do dinucleófilo nos carbonos carbonílicos do composto **1** com posterior eliminação de água através da migração do grupo fenila. Obtivemos a pirrolinona **5** com 20% de rendimento (não otimizado), provavelmente este baixo rendimento é devido a degradação/descarboxilação do dinucleófilo **2**.

Neste contexto resolvemos avaliar a reatividade do composto **1** com dinucleófilos menos impedidos estéricamente. O composto do tipo triazin-3-ona **6** foi obtido com 75% de rendimento quando empregamos a semicarbazida **3** como N,N-dinucleófilo. Devido ao bom resultado desta reação empregamos como dinucleófilo a tiosemicarbazida **4** e obtivemos a triazin-3-tiona com bom rendimento

conforme Esquema 1. Estes compostos foram analisados por RMN e em ambos os casos, na obtenção dos compostos **6** e **7**, não observamos a migração do grupo fenil.



Esquema 1.

Estas reações foram realizadas empregando forno de microondas doméstico (Brastemp, modelo JET Defrost-27L ) na ausência de solvente com tempo e potência de acordo com o Esquema 1. Foi utilizado um excesso do dinucleófilo para formação dos N-heterociclos.

### Conclusões

Este trabalho possibilitou a obtenção de compostos heterociclos de diferentes classes e funcionalização dependendo do dinucleófilo empregado. Observamos melhores rendimentos quando empregamos dinucleófilos que não sofram degradação nas condições empregadas. Entretanto o emprego do composto **2** como dinucleófilo nos possibilita a obtenção de compostos heterociclos do tipo pirrolinona com diferentes substituintes.

### Agradecimentos

FAPERGS  
CAPES,

<sup>1</sup> Agami,C. Beauseigneur,A. Comesse,S.Dechoux,L. Tetrahedron Let. **2003**, *44*, 7667-7669.