

Síntese regioseletiva de novas 3-aryl-7-(trifluormetil)-1,2,4-triazolo[4,3-a]pirimidinas

Nilo Zanatta* (PQ), Simone S. Amaral (PG), Débora L. de Mello (IC), Josiane M. dos Santos (IC), Cristieli Kopp (IC), Hélio G. Bonacorso (PQ) e Marcos A. P. Martins (PQ)

Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria - UFSM, Av. Roraima, 1000, Bairro Camobi, 97.105-900, Santa Maria, RS, Brasil.

*Autor: Tel./fax: (55) 3220-8756; e-mail: zanatta@base.ufsm.br

Palavras Chave: 1,2,4-triazolo pirimidinas, cloreto de cobre (II), 1-benzilideno-pirimidin-2-il]hidrazinas.

Introdução

Os triazóis constituem uma importante classe de compostos heterocíclicos devido ao amplo espectro de atividades farmacológicas que apresentam. Mais especificamente, os 1,2,4-triazóis fundidos são conhecidos por expressarem atividade antifúngica, bactericida, ansiolítica, anticonvulsante, herbicida, antidepressiva, entre outras.¹ Assim, esse trabalho descreve a síntese de novas 3-aryl-7-(trifluormetil)-1,2,4-triazolo[4,3-a]pirimidinas (**3,4a-f**) empregando cloreto de cobre (II) como catalisador.

Resultados e Discussão

Uma série de 3-aryl-7-(trifluormetil)-1,2,4-triazolo[4,3-a]pirimidinas (**3,4a-f**) foram obtidas através da oxidação catalítica de 1-benzilideno-2-[4-(trifluormetil)pirimidin-2-il]hidrazinas (**1,2a-f**) com cloreto de cobre (II).¹

Todas as reações foram realizadas empregando DMF como solvente e com excesso de 2 equivalentes de cloreto de cobre (II). Os rendimentos dessas reações estão entre baixos e moderados variando entre 25-70%. Os tempos reacionais foram de 4h para os compostos **3a-f** e 16h para os compostos **4a-f**.

De acordo com os resultados obtidos, as α-(N)-hidrazonas heterocíclicas precursoras podem conter tanto grupos doadores quanto retiradores de elétrons em suas estruturas sem que os tempos reacionais ou os rendimentos sejam afetados apreciavelmente.

A heterociclicização oxidativa das hidrazonas **1,2a-f** podem gerar dois regioisômeros distintos: isômero angular e linear (**Fig. 1**). Porém, as condições empregadas neste trabalho foram regioseletivas fornecendo apenas um isômero.

As estruturas das triazolopirimidinas foram atribuídas através da análise de seus dados espectrais (RMN de ¹H e GC/MS). Além disso, estudos teóricos têm demonstrado que o fechamento do anel triazolínico por oxidação catalítica de pirimidinilhidrazonas favorece a obtenção do regioisômero angular.²

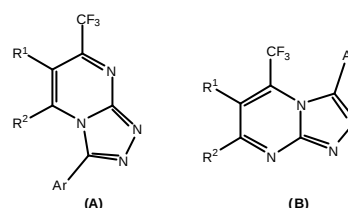
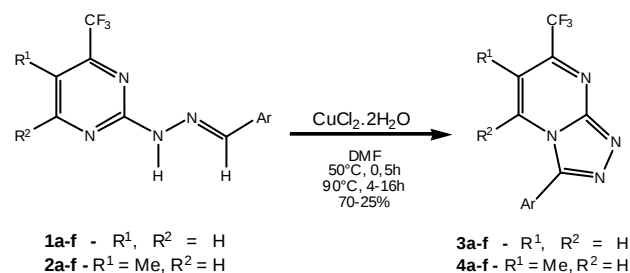


Figura 1. Regioisômero angular (A) e linear (B).

As hidrazonas utilizadas neste trabalho foram sintetizadas de acordo com metodologia previamente desenvolvida por nosso grupo de pesquisa (NUQUIMHE).³



1-4	a	b	c	d	e	f
Ar	Ph	2-OMe	4-OMe	4-Me	4-NO ₂	4-Cl

Esquema 1.

Conclusões

Este trabalho apresentou a síntese regioespecífica de novas 3-aryl-7-(trifluormetil)-1,2,4-triazolo[4,3-a]pirimidinas (**3,4a-f**) através da oxidação catalítica de 1-benzilideno-2-[4-(trifluormetil)pirimidin-2-il]hidrazinas (**1,2a-f**) com cloreto de cobre (II).

Agradecimentos

Os autores agradecem o suporte financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), CAPES e FAPERGS.

¹ Ciesielski, M.; Pufky, D.; Döring, M. *Tetrahedron* **2005**, 61, 5942.

² Awad, M. K.; Saleh, M. A. *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* **2004**, 678, 129.

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

³Zanatta, N.; Amaral, S.S.; dos Santos, J. M.; da Silva, F. M.; Bonacorso, H. G.; Martins, M. A. P.; Livro de Resumos SBQ; 2007, QO136.