

Síntese de novas pirimidinas 4-trifluorometiladas a partir de reações de dicianodiamida com α - β -enonas

Nilo Zanatta* (PQ), Leonardo Fantinel (PG), Liana da S. Fernandes (PG), Marcos A. P. Martins (PQ) e Helio G. Bonacorso (PQ).

Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, 97.105-900, Santa Maria, RS, Brasil. *Autor: Tel.: (55) 3220-8756; Fax: (55) 3220-8031; e-mail: zanatta@base.ufsm.br

Palavras Chave: dicianodiamida, enonas, pirimidinas.

Introdução

Derivados de pirimidinas substituídas na posição 4 por grupo trifluorometil são de grande valia, devido principalmente a algumas de suas propriedades importantes, como herbicida, fungicida e antiviral.¹

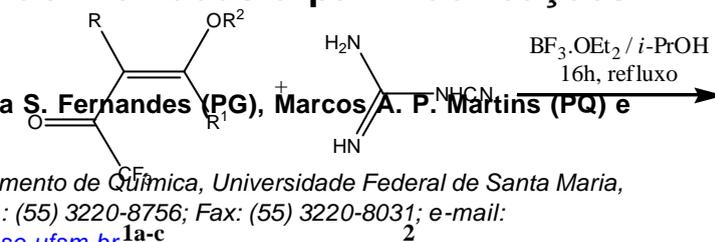
Neste trabalho desenvolvemos a síntese de 4-trifluorometil-2-ureido-pirimidinas-5,6-substituídas **4a-c** como versáteis precursores² para a síntese dos compostos (4-trifluorometil-3-oxibutil-1-enil-1,2-substituídos)-3-(4-(trifluorometil)pirimidin-2-il-5,6-substituídos)uréia **5a-f**.

A condensação de binucleófilos N-C-N com α,β -enonas e seus derivados é considerada a mais adequada para a síntese. A maioria dos trabalhos encontrados na literatura, referente à síntese de pirimidinas, contendo flúor, são derivados trifluorometilados.

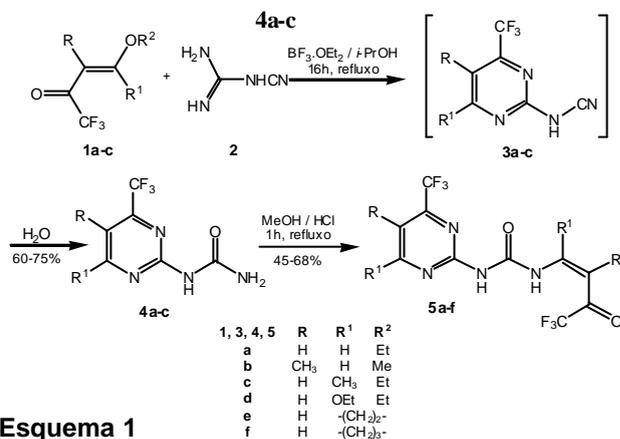
Resultados e Discussão

Foram realizadas reações de ciclocondensação entre 4-alcóxi-1,1,1-trifluor-3-alquen-2-onas **1a-c** e dicianodiamida **2**, com um mecanismo reacional em duas etapas, formando num primeiro momento as pirimidinas **3a-c**. Em seguida, após hidrólise, foram obtidos os compostos 4-trifluorometil-2-ureido-pirimidinas-5,6-substituídas **4a-c** inéditos de forma pura (Esquema 1).

É importante salientar que para a obtenção das pirimidinas **4a-c** foi empregado o uso de $\text{BF}_3 \cdot \text{OEt}_2$ (trifluoroboroeterato, 48%) em quantidade equimolar aos demais reagentes da reação e não em quantidade catalítica como descrito em trabalhos anteriores.² Nesta síntese, algumas condições reacionais foram testadas referente à utilização de solventes alcoólicos, como metanol, etanol, *iso*-propanol e *ter*-butanol. A dicianodiamida apresentou baixa solubilidade frente a estes solventes em temperatura ambiente. Nas condições reacionais utilizadas com temperatura de refluxo, o uso de *iso*-propanol foi o solvente que obteve melhor rendimento. No seguimento deste trabalho, foram obtidos os compostos (4-trifluorometil-3-oxibutil-1-enil-1,2-substituídos)-3-(4-(trifluorometil)pirimidin-2-il-5,6-



substituídos)uréia **5a-f** inéditos a partir dos intermediários 5,6-substituídos 4-trifluorometil-2-ureido-pirimidinas-5,6-substituídas **4a-c** numa reação de adição nucleofílica a ligação dupla α,β conjugada dos compostos 4-alcóxi-1,1,1-trifluor-3-alquen-2-onas **1a-f** (Esquema 1).



Esquema 1

Conclusões

Na concretização deste trabalho os objetivos propostos foram alcançados de modo satisfatório. As versáteis pirimidinas intermediárias inéditas **4a-c** foram obtidas a partir de reações de ciclocondensação com relativo grau de pureza e se mostraram eficientes na síntese das novas pirimidinas **5a-f** a partir de reações de adição nucleofílica a dupla α,β conjugada em rendimentos moderados.

Como destacado inicialmente, os derivados de pirimidinas trifluorometiladas são de grande interesse de estudos devido a suas importantes propriedades.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq, CAPES e FAPERGS pelo apoio financeiro.

1 Kreutzberger, A.; Schimmelpfennig, H. *J. Fluorine Chem.* **1980**, *15*, 511.

2 Sevenard, D. V.; Khomutov, O. G.; Koryakova, O. V.; Sattarova, V. V.; Kodess, M. I.; Stelten, J.; Loop, I.; Lork, E.;

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

Pashkevich, K. I.; Rösenthaler, G. V. *Synthesis*. **2000**, *12*,
1738-1748