

## Formação de *N*-acil-*N,N'*-diciclohexilureias a partir de diciclohexilcarbodiimida (DCC) e ácidos carboxílicos aromáticos

Thais C. M. Nogueira<sup>1</sup> (IC), Alessandra C. Pinheiro<sup>1,2\*</sup> (PG); Carlos R. Kaiser<sup>2</sup> (PQ); Marcus V. N. Souza<sup>1</sup> (PQ), Solange M. S. V. Wardell<sup>1</sup> (PQ), James L. Wardell (PQ)<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Tecnologia em Fármacos, Far-Manguinhos, FioCruz, CEP 21041-250 Rio de Janeiro, RJ, Brazil.

<sup>2</sup>Instituto de Química, Departamento de Química Orgânica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, CEP 68534, 21941-972 Rio de Janeiro - RJ, Brazil.

<sup>3</sup>Instituto de Química, Departamento de Química Inorgânica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, CEP 68563, 21945-970 Rio de Janeiro - RJ, Brazil.

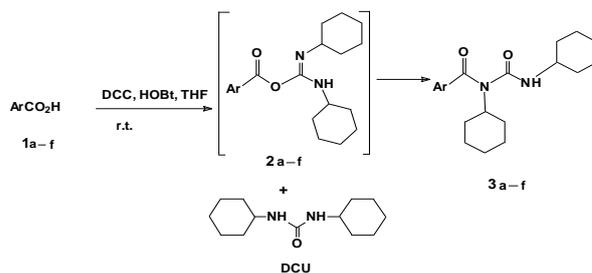
<sup>4</sup>Department of Chemistry, University of Aberdeen, Meston Walk, Old Aberdeen, AB24 3UE, Scotland.

\* e-mail: apinheiro@far.fiocruz.br

Palavras Chave: DCC, diciclohexilureias, rearranjo

### Introdução

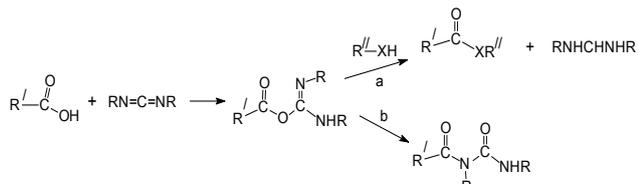
Carbodiimidas, tendo como reagente mais conhecido o diciclohexilcarbodiimida (DCC) são reagentes amplamente utilizados em síntese orgânica como reagentes de acoplamento. Além dessa aplicação são também utilizados na preparação de ésteres, anidridos e amidas, oxidação de álcoois e desidratação de substâncias hidroxiladas. Devido a importância desta classe de compostos, esse trabalho consiste na síntese e investigação de reações envolvendo ácidos carboxílicos aromáticos e DCC.



**Esquema 2** Formação de 3. Ar = (a) Ph; (b) p-O<sub>2</sub>NC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; (c) piridin-2-il; (d) piridin-3-il; (e) piridin-4-il; (f) pirazinil

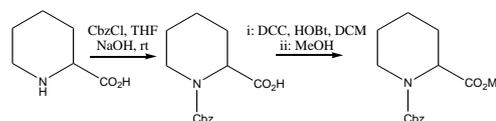
### Resultados e Discussão

A reação entre ácidos carboxílicos e di-iminas pode seguir basicamente por dois caminhos, como demonstrado no Esquema 1.



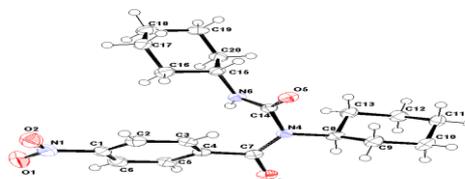
**Esquema 1.** Reações de ácidos carboxílicos com di-iminas : R''-XH = R''-OH, R''-NH<sub>2</sub>, etc

A reação empregando-se ácidos aromáticos e heteroaromáticos proporciona a obtenção das *N*-acil-*N,N'*-diciclohexilureias via uma reação de rearranjo (Esquema 2)<sup>2</sup>. Esse produto, devido à sua estabilidade, não reage com os nucleófilos utilizados impedindo assim que a reação de acoplamento ocorra. Este rearranjo foi evidenciado somente para ácidos carboxílicos aromáticos, já que ao se empregar um composto cíclico não aromático esta reação de acoplamento é observada (Esquema 3).



**Esquema 3** Reação com um ácido alifático

Os compostos obtidos foram identificados por RMN, e no caso do derivado do ácido p-nitro benzóico, **3b** por cristalografia de Raio-X (Esquema 4).



**Esquema 4** Estrutura do composto 3b

### Conclusões

De acordo com as reações utilizadas pode-se concluir que, em sistemas aromáticos, a formação do rearranjo é muito favorecida, levando à formação das estáveis *N,N'*-ciclohexilureias. Devido à sua formação a reação de obtenção de ésteres e amidas utilizando-se DCC não ocorre, fato esse que não é evidenciado em sistemas não aromáticos.

<sup>1</sup> [www.who.int/tb/en/](http://www.who.int/tb/en/) (acessada em 20/01/2009)

<sup>2</sup> Pinheiro, A. C.; Souza, M. V. N.; Kaiser, C. R.; Wardell, S. M. S. V. e Wardell, J. L. *J. Chem. Res.* **2008**, 8, 468.