

Síntese de novas pirimidinas trifluormetiladas a partir da 1,1,1-trifluor-4-alcoxi-5,5-difenil-3-penten-2-ona

Alex F. C. Flores (PQ), Morgana Doneda (IC), Alynne A. Souto (IC), Juliana L. Malavolta (PG), Mauro J. Martins (PG), Rayane B. Goularte (IC). mogui_doneda@yahoo.com.br

¹ Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, Rio Grande do Sul, Brasil.

Palavras chave: pirimidinas, ciclocondensação, β -alcoxiviniltrifluórmethyl cetona.

Introdução

Compostos heterocíclicos possuem grande importância devido a sua aplicabilidade nos mais diversos campos da química moderna, e devido à enorme variedade e complexidade estrutural, que possibilita a geração de uma vasta série de novas estruturas com propriedades químicas e físicas diversas¹.

Dentre os sistemas heterocíclicos, destacam-se as pirimidinas e seus derivados que atraem o interesse de pesquisadores, devido sua importância medicinal e biológica². Isso ocorre principalmente porque elas estão presentes em organismos vivos e muitas delas fazem parte de moléculas de ácidos nucleicos, como DNA e RNA, os quais são essenciais na biossíntese de proteínas. Essa bioatividade pode ser modificada ou desativada, dependendo do tipo e da posição dos substituintes. Compostos pirimidínicos têm sido usados na medicina como antibióticos, anti-neoplásicos, entre outras atividades³.

Assim, o objetivo deste trabalho é a síntese de novas pirimidinas trifluormetiladas geradas a partir da reação de amidinas com 1,1,1-trifluor-4-alcoxi-5,5-difenil-3-penten-2-ona.

Resultados e Discussão

Para a síntese dos compostos, foi utilizado como material de partida a 1,1,1-trifluor-4-alcoxi-5,5-difenil-3-penten-2-ona **1**, que é sintetizada a partir da reação de acetilização e posterior acilação da 1,1-difenilacetona, que tem sua síntese já bem estabelecida em nossos laboratórios².

O composto **1** é levado à reação de ciclocondensação com cloridrato de benzamidina, cloridrato de acetamidina, sulfato de 2-metil-2-tiopseudouréia e cloridrato de 1H-pirazolil-1-carboxamidina, para a formação dos produtos **2-5**. A reação procede-se em meio básico através da utilização de solução de hidróxido de sódio 1M em meio alcoólico de metanol. A mistura reacional é deixada sob agitação durante 1h a temperatura ambiente e os produtos são obtidos em bons rendimentos e alto grau de pureza conforme a figura 1.

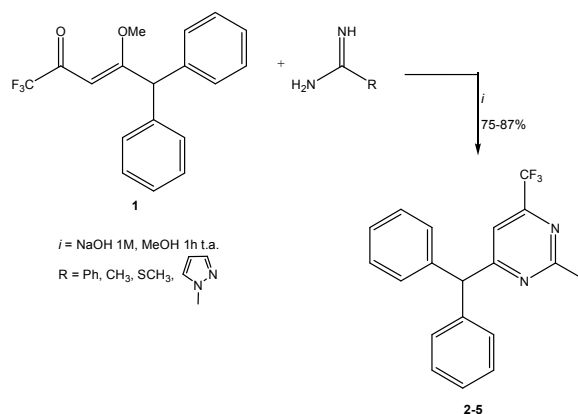


Figura 1. Esquema geral para as síntese das pirimidinas trifluormetil substituídas.

Os produtos são sólidos, e quando necessário, purificados através de recristalização em hexano a quente. Suas estruturas são comprovadas por técnicas de RMN de ¹H e ¹³C, apresentando em seus espectros os sinais característicos para este tipo de compostos.

Conclusões

Foi desenvolvida neste trabalho uma rota sintética simples, eficiente e em condições brandas para a obtenção das pirimidinas. Os produtos alvo apresentam-se como anéis aromáticos, não sendo observado formação de produtos hidratados, além de serem estáveis termodinamicamente e possuírem alto valor agregado.

Agradecimentos

CNPq, CAPES e FAPERGS

¹ Fores, A. F. C.; Pizzuti, L.; Rossatto, M.; Zanatta, N.; Martins, M. A. P.; Brondani, S. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, v. 18, p. 1316-1321, 2007.

² Pizzuti, L. *Dissertação de Mestrado*, UFSM, 2005.

³ Katritzky and Ress. *Comprehensive Heterocyclic Chemistry*, vol 1-8, Pergamon Press, Oxford, 1st ed. 1984, 2nd ed. 1995.