

## Reações de acoplamento entre tióis e haletos arílicos catalisadas por óxido de cobre.

Vanessa Loren Nunes<sup>1</sup> (PG), Ingrid Cristina de Oliveira<sup>1</sup> (IC)\*, Olga Soares do Rêgo Barros<sup>1</sup> (PQ).

[grynd123@gmail.com](mailto:grynd123@gmail.com)

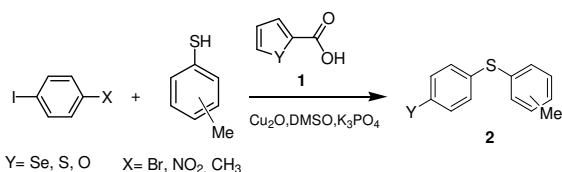
Palavras Chave: Sulfetos arílicos, acoplamento cruzado, 2-tiofenocarboxilato

### Introdução

Sulfetos arílicos são encontrados em muitos fármacos importantes. Assim, métodos para a formação dos mesmos são de grande importância para a indústria farmacêutica,<sup>1</sup> e para a síntese orgânica como intermediários sintéticos. Desta forma, o uso de metais de transição como catalisadores para a formação da ligação (S-Csp<sup>2</sup>) é de grande relevância.<sup>2</sup> Aliado a isso, Cobre mediando reações de acoplamento cruzado, apresenta-se como alternativa de baixo custo, quando comparada a catálise de Paládio.

### Resultados e Discussão

Neste trabalho, estudamos a influência dos ligantes bidentados (Tabela 1), nas reações de acoplamento cruzado entre tióis e haletos arílicos catalisada por óxido de cobre I, utilizando DMSO como solvente e K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> como base (Esquema 1).



Esquema 1

**Tabela 1.** Estudo dos ligantes da reação entre iodeto arílico e benzenotiol.

	Ligante	Substrato	Haleto de arila	Prod. (%)
1				<b>2(95)</b>
2				<b>2(98)</b>
3				<b>2(90)</b>

\*1 (0,20mmol), Cu<sub>2</sub>O(0,10mmol), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>(2mmol), DMSO(6mL), iodeto arílico (1,0mmol), tiol(0,5mmol).

**Tabela 2.** Reações de acoplamento entre iodeto arílico e benzenotiol.

34<sup>a</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

	Substrato	Haleto de arila	Produto 2	Rend. (%)
a				74
b				45
c				80
d				90

Após uma análise detalhada, dos experimentos realizados até então, e dos dados contidos na tabela 1, considerou-se como condição ideal para a reação de acoplamento, a adição do ligante tiofeno carboxilato **1** (0.20 mmol) seguida da adição do óxido de cobre (0.10 mmol) e do solvente DMSO (3 mL), que são deixados sob refluxo por duas horas. Em seguida adiciona-se o iodeto arílico (1 mmol), o tiol (0,5 mmol) e a base K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> (2 mmol) após 22h sob refluxo, obteve-se o sulfeto arílico **2** em 98% de rendimento. Determinada a condição reacional, estendeu-se a mesma para uma série de benzenotióis e haletos arílicos mostrados na tabela 2. Os produtos **2a-d** (Tabela 2) foram caracterizados por espectroscopia de RMN <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C.

### Conclusões

Foi realizado o estudo das reações de acoplamento tipo Buchwald com diferentes haletos arílicos e benzenotióis, o escopo desta reação encontra-se em estudo no nosso laboratório.

### Agradecimentos

À Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química (IQ) e ao CNPQ pelas bolsas concedidas a Nunes, V.L. e Oliveira, I.C.

<sup>1</sup> Itoh, T.; Mase, T. *Org. Lett.* **2004**, *6*, 4587-4590.

<sup>2</sup> Kwong, F. Y.; Buchwald, S. L. *Org. Lett.* **2002**, *4*, 3517-3520.