



## XXXV SALÃO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

6 a 10 de novembro

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2023: SIC - XXXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2023
<b>Local</b>	Campus Centro - UFRGS
<b>Título</b>	Nova metodologia para a síntese de dibenzotiofenos (DBT) via ciclização radicalar promovida por Rongalite
<b>Autor</b>	VINÍCIUS ALVES RESEM DA ROSA
<b>Orientador</b>	PAULO HENRIQUE SCHNEIDER

Compostos contendo o núcleo Dibenzotiofeno (DBT) vêm recebendo destaque em química dos materiais devido às suas interessantes propriedades fotofísicas e boa mobilidade de carga, tornando-os uma promissora classe de heterociclos para a construção de materiais fotoativos como dispositivos OLED's (Diodos Orgânicos Emissores de Luz). Neste trabalho, propõe-se uma nova síntese de DBT's a partir de sulfetos de diarila, via ciclização intramolecularradicalar promovida por Rongalite<sup>®</sup>, visando a construção de uma nova ligação C-C sem a utilização de metais de transição. A Rongalite<sup>®</sup> foi recentemente descrita na literatura como uma geradora de radicais arílicos a partir de haletos de arila via a formação *in situ* do radical aniônico Sulfoxilato ( $\text{SO}_2^{\bullet-}$ ) como iniciador, formado através de uma reação entre Rongalite<sup>®</sup> e uma base forte. Para a reação modelo deste projeto, sintetizou-se o material de partida sulfeto de difenila contendo um átomo de iodo em posição *orto* à ligação C(arila)-S, a fim de promover a construção de uma nova ligação C-C. A reação de ciclização intramolecular emprega o ânion radicalar  $\text{SO}_2^{\bullet-}$  como doador de elétrons para a formação de radicais arílicos, permitindo a construção do núcleo DBT. Os testes reacionais preliminares levaram à formação do produto de interesse, detectado por análise de Cromatografia Gasosa acoplada à Espectrometria de Massas (GC-MS). Porém, a reação inevitavelmente apresentou um subproduto de hidrogenação na posição de formação do radical arílico, o qual não foi possível separar do produto de interesse por recristalização ou cromatografia em coluna. Futuramente, variações nos parâmetros reacionais serão investigadas a fim de aprimorar a seletividade desta reação em prol da formação do produto de ciclização. Em resumo, este estudo introduz uma estratégia inovadora para a síntese de compostos DBT's por meio de uma abordagem de ciclização radicalar, oferecendo potencial para a síntese de moléculas relevantes para aplicações no desenvolvimento de materiais e dispositivos optoeletrônicos.