

Laura Maria Forain Miolo (IC), Tiago Lima da Silva (PG), Paulo Henrique Schneider (PQ)
E-mail: paulos@iq.ufrgs.br

Laboratório de Síntese Orgânica e Materiais Inteligentes (LASOMI)
Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre-RS.

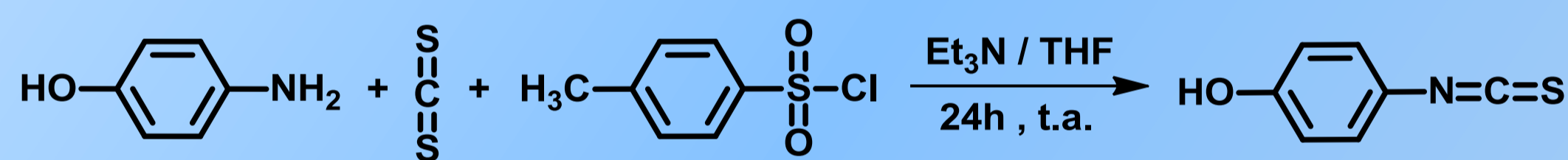
Introdução

A classe de substâncias denominadas de ditiocarbamatos tem recebido considerada atenção devido as suas inúmeras aplicações na agroquímica¹, medicina² e síntese orgânica³. Os compostos derivados do selênio possuem efeitos farmacológicos comprovados⁴, no entanto não há investigação sobre a química e farmacologia dos análogos de selênio na estrutura dos tiocarbamatos.

Neste contexto, a síntese destes compostos de selênio, os tiosselenocarbamatos, surge como uma área promissora na síntese orgânica e na farmacologia. Neste trabalho, estudamos duas metodologias para a síntese desses compostos.

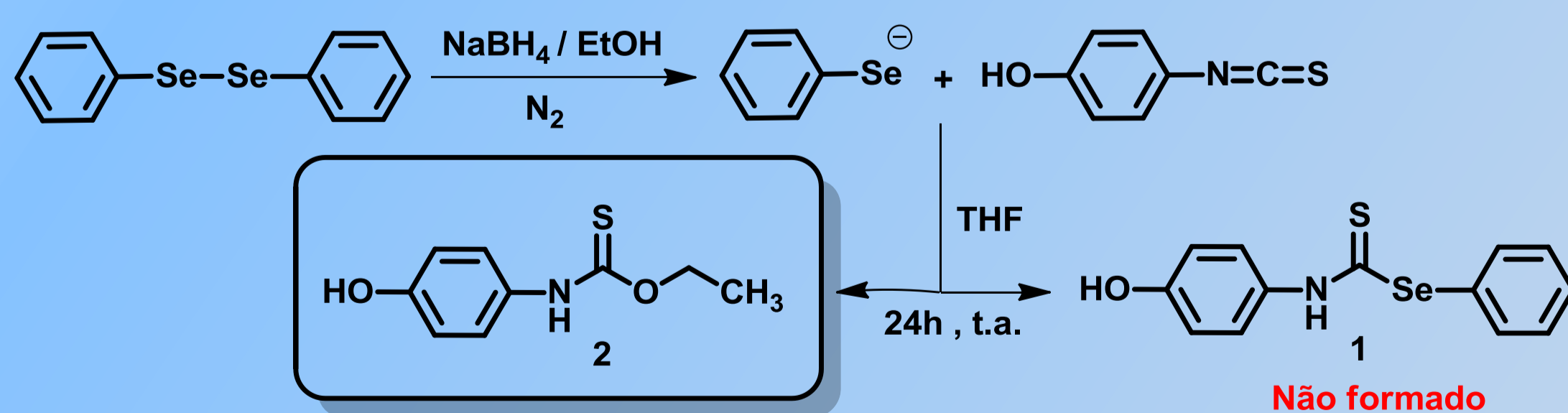
Resultados e Discussões

Os isotiocianatos utilizados como material de partida para a obtenção dos compostos de interesse são facilmente obtidos ao reagir uma amina com dissulfeto de carbono na presença de uma base de Lewis e cloreto de tosilato⁵ (Esquema 1).



Esquema 1: Reação de obtenção do isotiocianato.

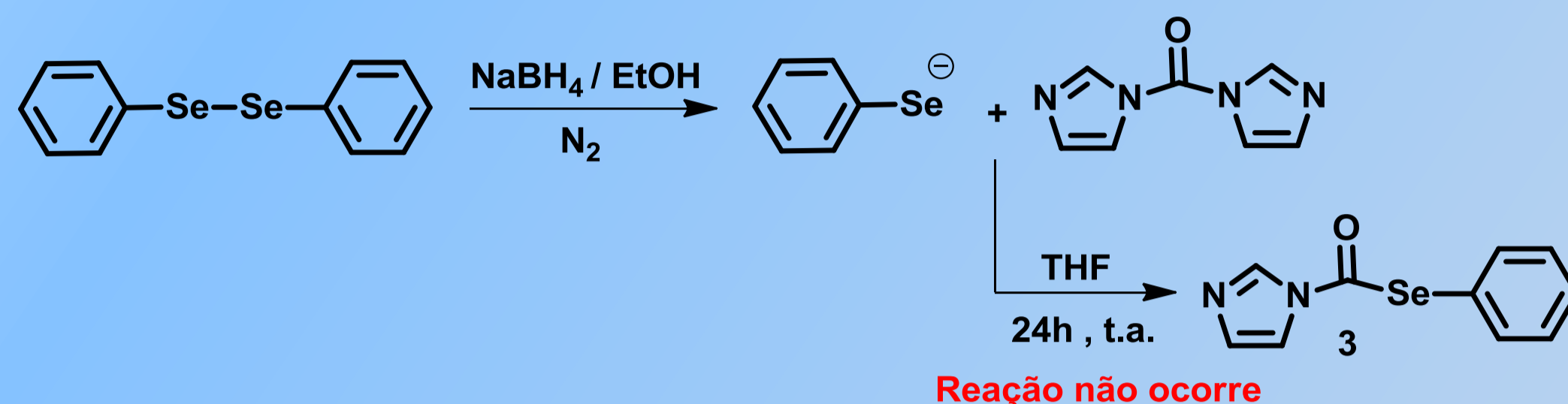
A primeira abordagem para a obtenção de tiosselenocarbamatos se iniciou com a clivagem do disseleneto de difenila utilizando borohidreto de sódio em solução alcoólica e posterior adição a uma solução de THF contendo o isotiocianato⁶ (Esquema 2). Neste caso, não observamos a formação do produto esperado. Através de análises de RMN ¹H pudemos confirmar a formação de outro produto (**2**), obtido pela inserção da etoxila, proveniente do etóxido de sódio formado no meio básico.



Esquema 2: Reação de obtenção de tiosselenocarbamato a partir de isotiocianato pela metodologia 1.

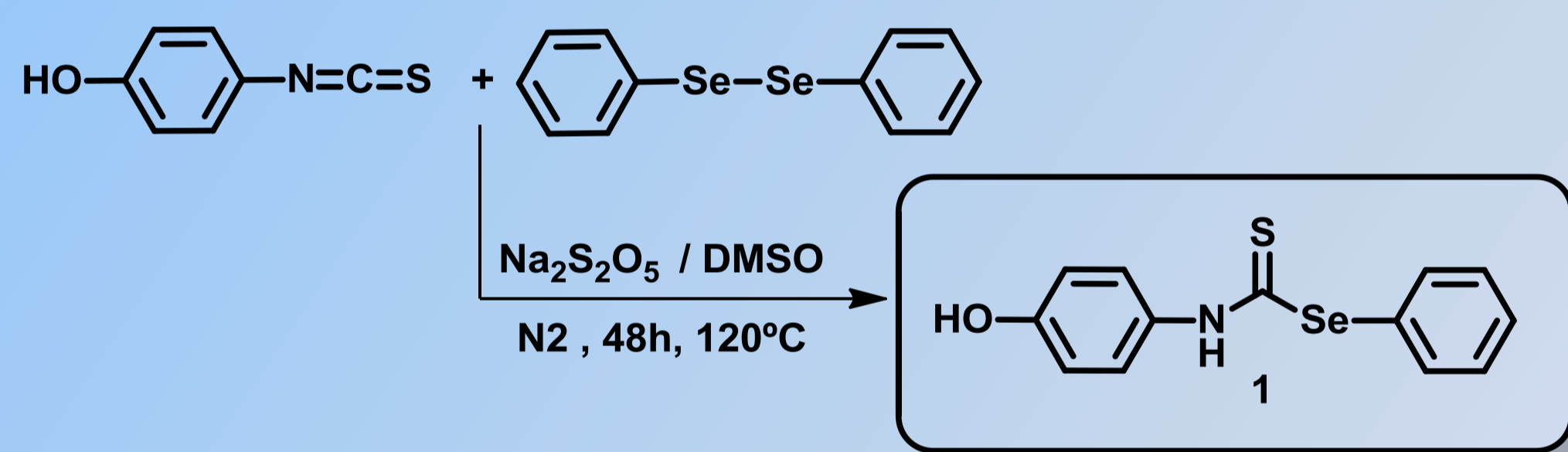
Com o insucesso da primeira tentativa e, utilizando a mesma metodologia citada acima, pensou-se na utilização do reagente 1,1-carbonil-diimidazol, um bom transferidor de acila, como material de partida, para formar o intermediário **3** que poderia levar ao análogo selenocarbamato (Esquema 3).

Essa reação também não levou a formação do produto, sendo recuperados os reagentes de partida.



Esquema 3: Reação de obtenção de selenocarbamato a partir do 1,1-carbonil-diimidazol pela metodologia 1.

A segunda metodologia investigada consiste na utilização de *meta*-bissulfito de sódio para a clivagem do disseleneto⁷. Esta metodologia é feita *one pot* na qual se adiciona o disseleneto de difenila, isotiocianato, *meta*-bissulfito de sódio em DMSO e atmosfera inerte (Esquema 4). O produto formado foi inicialmente caracterizado por RMN ¹H evidenciando a formação do mesmo.



Esquema 4: Reação de obtenção de tiosselenocarbamato a partir do isotiocianato pela metodologia 2.

Conclusões

A segunda metodologia desenvolvida para a síntese do tiosselenocarbamato mostrou-se eficiente. O produto está sendo purificado e caracterizado. A metodologia será otimizada e estendida a outros isotiocianatos e disselenetos. Pretendemos ainda, utilizar o reagente 1,1-tiocarbonil-diimidazol como material de partida, diminuindo assim o número de etapas na síntese desses compostos.

Referências Bibliográficas

- Caldas, E. D.; Hosana Conceicua, M.; Miranda, M. C. C.; Souza, L.; Lima, J. F. J. *Agric. Food Chem.* **2001**, 49, 4521.
- Ronconi, L.; Marzano, C.; Zanello, P.; Corsini, M.; Miolo, G.; Macca, C.; Trevisan, A.; Fregona, D. *J. Med. Chem.* **2006**, 49, 1648.
- Wood, M. R.; Duncalf, D. J.; Rannard, S. P.; Perrier, S. *Org. Lett.* **2006**, 8, 553.
- Nogueira, Cristina W.; Rocha, João B.T. *J. Braz. Chem. Soc.* **2010**, 21, 11, 2055.
- Rince Wong, Sarah J. Dolman. *J. Org. Chem.*, **2007**, 72, 10, 3969.
- Back, G. Thomas; Kerr, Russel G. *Tetrahedron.* **1985**, 41, 21, 4759.
- Westwell A. D., Bagley M. C., Weekes A. A. *Tetrahedron.* **2011**, 67, 7743.

Agradecimentos

