

Síntese de Selenofenos 2,5-dissubstituídos utilizando o sistema $Se^0/KOH/DMSO$

Douglas Bernardo Paixão¹, Prof. Dr. Paulo Henrique Schneider¹.

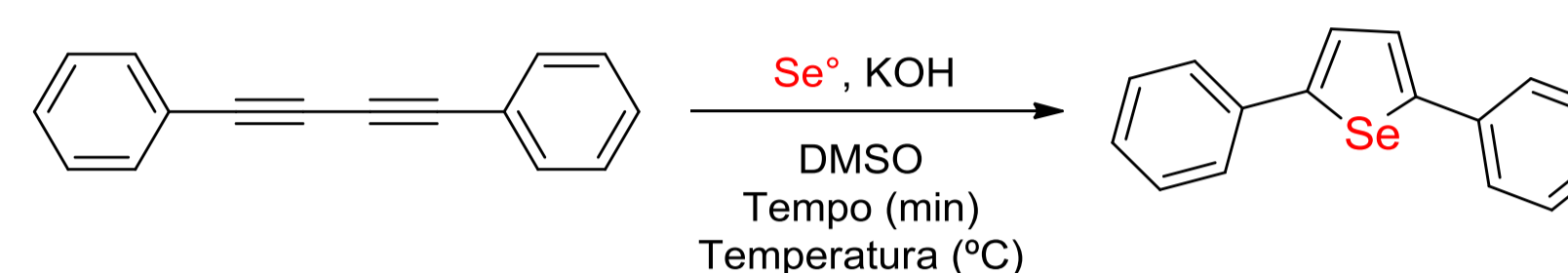
¹Instituto de Química, Departamento de Química Orgânica, Laboratório de Catálise Molecular (302), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves, 9500, CEP 91501-970, Porto Alegre/RS, paulos@iq.ufrgs.br

Introdução

Calcogenofenos heterocíclicos (S, Se, Te) possuem inúmeras aplicações em bioquímica, síntese orgânica e ciência dos materiais.¹ Estes compostos vem sendo estudados intensivamente nos últimos anos como materiais orgânicos moleculares.² Seus métodos de preparação são limitados, geralmente envolvendo a síntese em várias etapas, uso de reagentes de alto valor e condições reacionais severas.³

Este projeto tem como objetivo desenvolver um novo método para a obtenção de selenofenos 2,5-dissubstituídos empregando o sistema $Se^0/KOH/DMSO$ (figura 1), com condições reacionais simples, poucas etapas e reagentes de custos moderados.

Tabela 1. Otimização das condições reacionais.



Entrada ^a	Temperatura (°C)	Tempo (min)	Conversão (%) ^c	Rendimento (%) ^d
1	25	150	0	0
2	50	150	0	0
3	110	15	100	75
4 ^b	110	5	100	75

^a 0.10 mmol de 1,4 - difenilbutadiino / 3.0 equiv. de Se^0 / 4.5 equiv. de KOH / 5 mL de DMSO;
^b 0.10 mmol de 1,4 - difenilbutadiino / 4.5 equiv. de Se^0 / 9.0 equiv. de KOH / 5 mL de DMSO;
^c Conversão do produto calculada via cromatografia gasosa;
^d Rendimento isolado, após cromatografia em coluna.

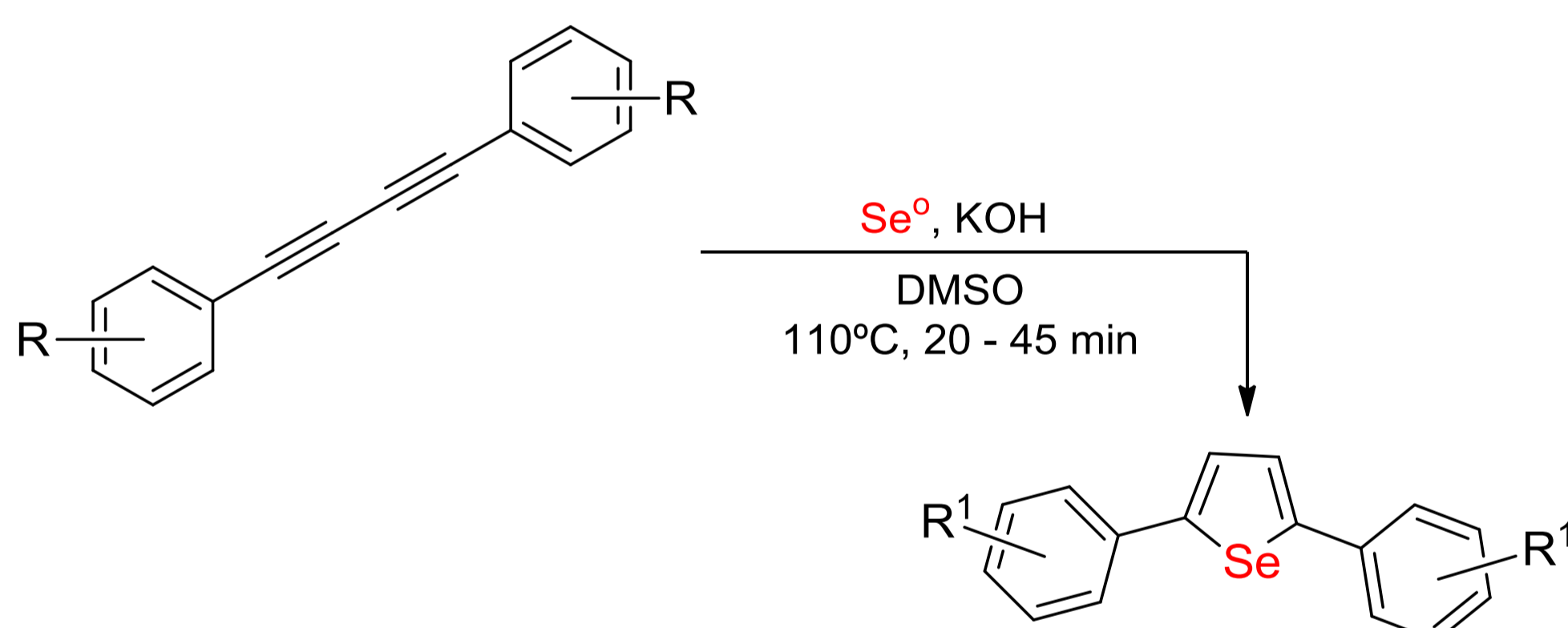


Figura 1. Síntese de selenofenos 2,5-dissubstituídos utilizando o sistema $Se^0/KOH/DMSO$.

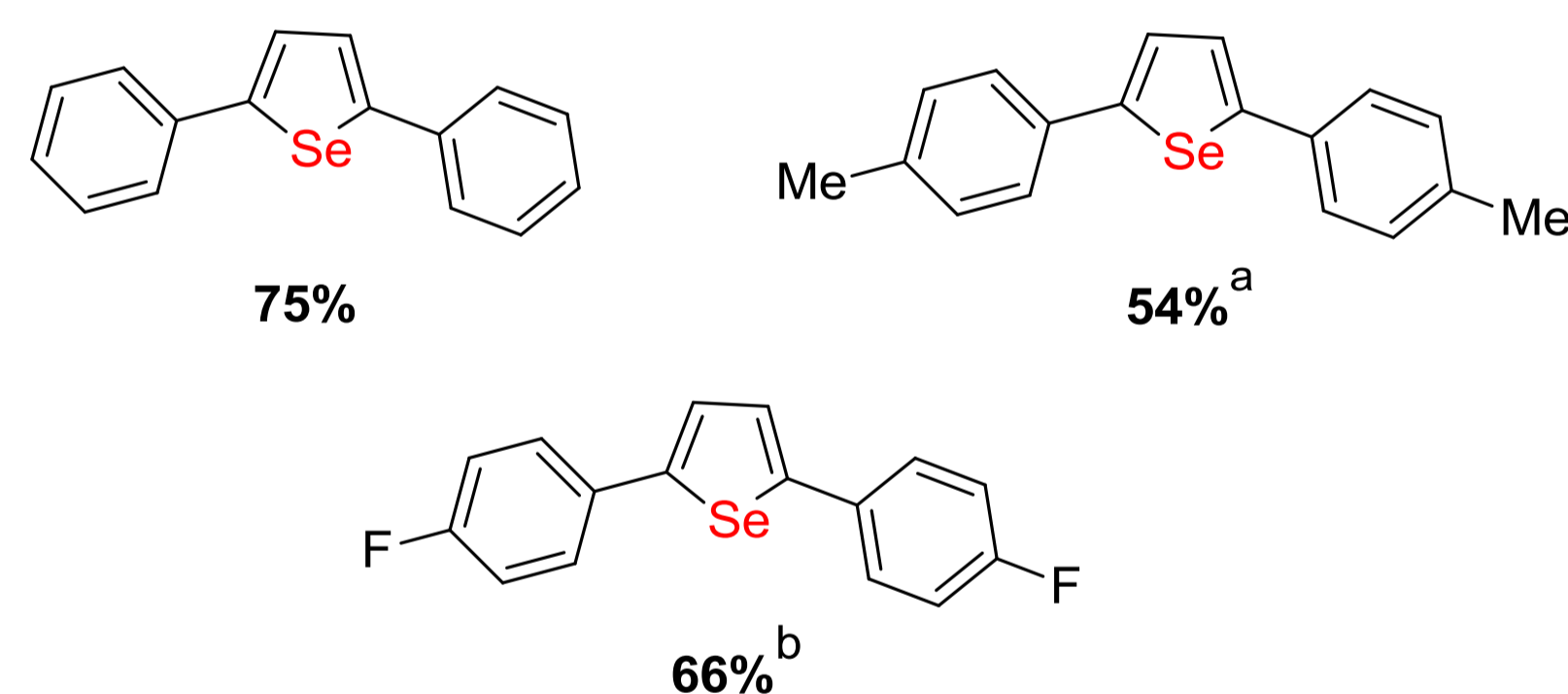


Figura 2. Escopo reacional da síntese de selenofenos 2,5 dissusubstituídos.

^a tempo reacional: 45 minutos;
^b tempo reacional: 20 minutos.

Resultados e discussões

Conforme descrito na literatura, calcogênios elementares ($Y = S, Se, Te$) dão origem a suas espécies nucleofílicas (Y^{2-}) quando reagem com bases fortes.⁴ Partindo-se desse princípio, foram realizados vários testes utilizando o eletrófilo 1,4-difenilbutadiino sob o sistema $Se^0/KOH/DMSO$, tendo em vista preparação de selenofenos 2,5-dissubstituídos. Surpreendentemente, estas reações ocorrem rapidamente, sendo necessário somente 15 minutos para o consumo total dos reagentes (tabela 1). Uma vez definidas as condições ótimas de reação, avaliou-se o escopo reacional na síntese destes compostos empregando o sistema $Se^0/KOH/DMSO$ (figura 2).

Conclusões

Foi desenvolvido um método simples, utilizando reagentes de custo moderado e tempos reacionais relativamente baixos para a síntese de selenofenos 2,5-dissubstituídos. Nas próximas etapas da pesquisa, o escopo reacional continuará sendo avaliado, bem como o mecanismo da reação.

Referências

- (a) Patra, A.; et al. *Chem Mater.* **2011**, 23, 896. (b) Coropceanu, V.; et al. *Chem. Rev.* **2007**, 107, 926.
- (a) Lin, L. Y.; et al. *Org. Lett.* **2011**, 13, 4962; (b) C. Kim, M. C.; et al. *Org. Electron.* **2010**, 11, 801. (c) Gronowitz, S.; Hornfeldt, A. B. *Thiophenes*, Elsevier, Oxford, **2004**.
- Rhoden, C. R. B.; Zeni, G. *Org. Biomol. Chem.* **2011**, 9, 1301. (b) Schipper, D. J.; Fagnou, K. *Chem. Mater.* **2011**, 23, 1594. Maity, P.; et al. *Org. Lett.* **2014**, 16, 4122.
- Trofimov, B. A.; et al. *Tetrahedron.* **1982**, 38, 713.