

## SÍNTESE DE 4,7-BIS-(ARILSELANILBENZO[b]FURANIL) BENZO-2,1,3-TIADIAZÓIS UTILIZANDO UMA METODOLOGIA VERDE (TCCA/ETANOL)

RENATA AZEVEDO BALAGUEZ<sup>1</sup>; ROBERTA KRÜGER<sup>2</sup>; JOSÉ SEBASTIÃO DOS SANTOS NETO<sup>2</sup> DIEGO ALVES<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Universidade Federal de Pelotas 1 – renata.balaguez@gmail.com

<sup>2</sup> Universidade Federal de Pelotas – robertinhakruger@hotmail.com

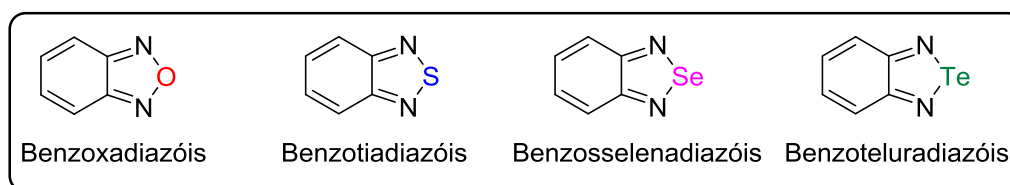
<sup>2</sup> Universidade Federal de Pelotas – zeneto.qmc@gmail.com

<sup>3</sup> Universidade Federal de Pelotas – diego.alves@ufpel.edu.br

### 1. INTRODUÇÃO

Compostos heterocíclicos possuem uma importância incontestável no cotidiano uma vez que, estão presentes nas mais diversas estruturas biologicamente ativas, sendo bastante explorados pelas indústrias como agroquímicos, fármacos e cosméticos.<sup>1</sup> Contudo, os heteroátomos comumente encontrados na síntese de heterociclos são os que possuem em sua estrutura os átomos de nitrogênio, enxofre e oxigênio, respectivamente. Neste contexto, novos compostos contendo os átomos de selênio e telúrio surgem como uma importante alternativa uma vez que estimula testes bioquímicos, farmacológicos ou no desenvolvimento de novos materiais.<sup>2</sup>

Neste sentido, uma classe de compostos heterocíclicos que vem sendo bem explorada ultimamente são os benzocalcogenodiazóis (Figura 1). Os compostos desta classe são interessantes por estarem presentes na composição química de diversos herbicidas, fungicidas e bactericidas.<sup>3</sup> Além disso, os benzocalcogenodiazóis possuem propriedades fluorescentes, o que permite com que os mesmos sejam muito aplicados na síntese de novos materiais.<sup>4</sup>



**Figura 1.** Representação química da classe dos benzocalcogenodiazóis.

Compostos fluorescentes têm sido abundantemente explorados nas áreas científicas e tecnológicas, principalmente como compostos orgânicos diodos emissores de luz (OLED). A fluorescência de moléculas orgânicas torna esses compostos aplicáveis em diversas áreas, como medicinais, biológicas e industriais como por exemplo, quantificadores seletivos de DNA, marcadores de células cancerígenas e cristais líquidos.<sup>4</sup>

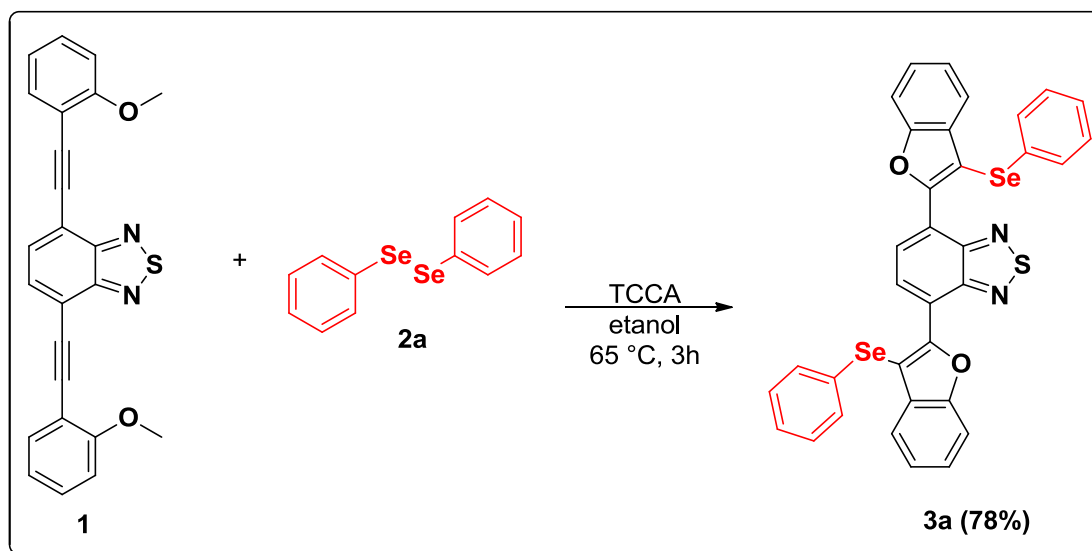
Tendo em vista, a diversidade de áreas a serem exploradas com a síntese de novos compostos com propriedades fotofísicas, este trabalho tem por objetivo realizar a síntese dos 4,7-bis-(arilselanilbenzo[b]furanil) benzo-2,1,3-tiadiazóis **3** utilizando como precursores sintéticos o 4,7-bis-((2-metoxifenil)etil) benzo-2,1,3-tiadiazol **1** e disselenetos de diorganoila **2** utilizando uma metodologia ambientalmente amigável.

## 2. METODOLOGIA

Inicialmente fez-se alguns estudos de otimização reacional com intuito de encontrar as melhores condições para síntese do 4,7-bis-(fenilselanilbenzo[*b*]furanil) benzo-2,1,3-tiadiazol **3a**. Avaliaram-se as quantidades estequiométricas dos reagentes benzotiadiazol **1** e disseleneto de difenila **2a**, assim como os mediadores de reação, o solvente ideal, a necessidade de aquecimento e atmosfera inerte ou aberta.

Após este estudo identificou-se que a melhor condição reacional para síntese do produto desejado **3a** foi utilizando-se 0,50 mmol do disseleneto **2a**, o qual foi solubilizado em 2,00 mL de etanol, em seguida adicionou-se 0,17 mmol do mediador da reação TCCA (ácido tricloroisocianúrico) e por fim adicionou-se 0,15 mmol do benzotiadiazol **1**.

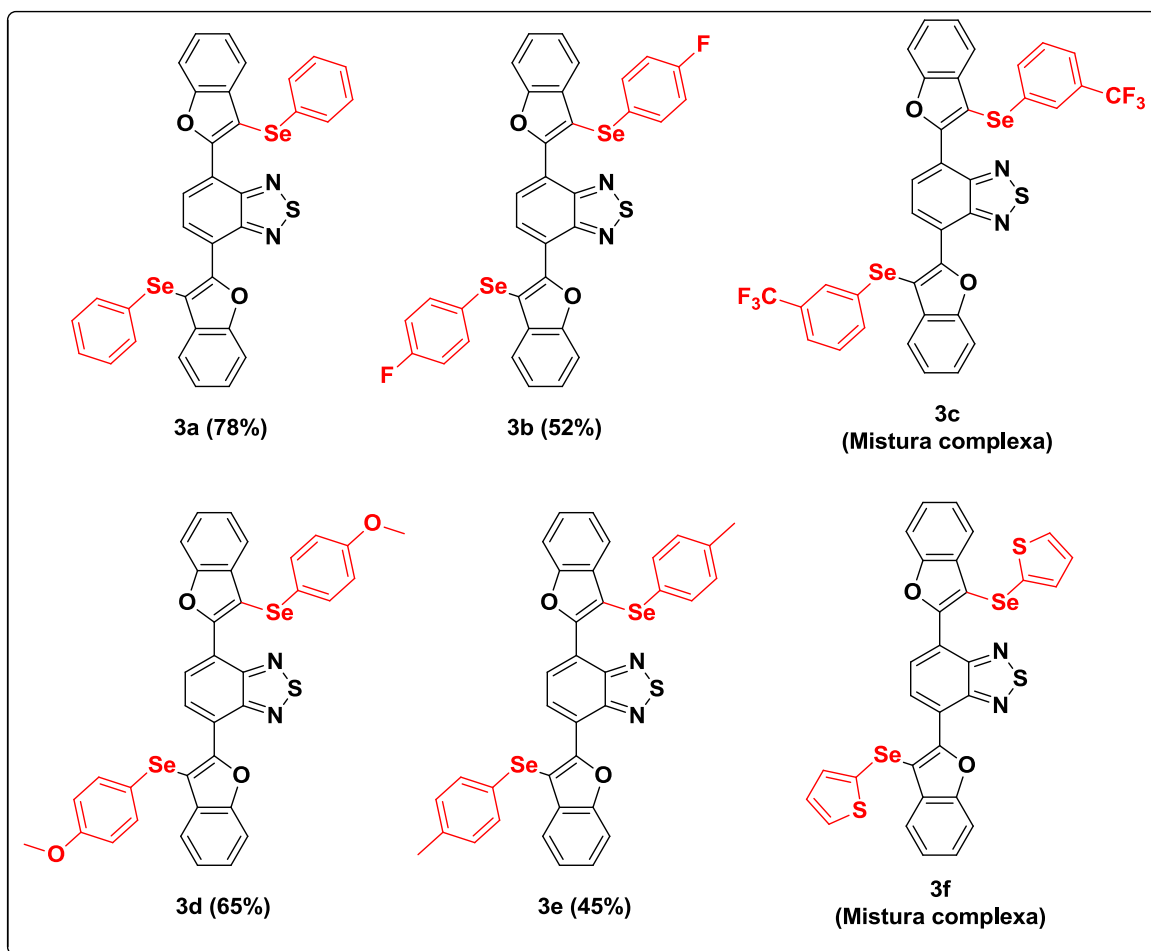
A reação manteve-se sob agitação magnética e em sistema aberto, fixando-se a temperatura em 65 °C e através de acompanhamento por cromatografia de camada delgada (CCD) verificou-se que após 3 h de reação houve o consumo total do reagente **1** e a formação de outro produto, que após o processo de purificação e identificação por espectrômetro de massas e ressonância magnética de hidrogênio e carbono constatou-se ser o produto **3a**, o qual foi obtido com 78% de rendimento.



Esquema 1.

## 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com a melhor condição de reação estabelecida, fixou-se o 4,7-bis-((2-metoxifenil)etnil) benzo-2,1,3-tiadiazol **1** e variaram-se os disselenetos de diorganoila **2a-f**, utilizando-se o disseleneto de difenila, disselenetos com substituintes retiradores e doadores de elétrons, assim como o disseleneto de ditienila, com intuito de avaliar a versatilidade do método. Os resultados deste estudo encontram-se sumarizados na Figura 2.



**Figura 2.** Versatilidade da síntese de 4,7-bis(arylselanilbenzofuranil) benzo-2,1,3-tiadiazóis **3a-f**.

É importante salientar que, até o presente momento apenas seis exemplos foram sintetizados, contudo, não foi possível realizar uma purificação eficiente dos produtos **3c** e **3f** utilizando coluna cromatográfica em óxido de alumina neutra como fase estacionária, apesar da verificação da formação dos mesmos por CCD e confirmação por espectro de massas.

#### 4. CONCLUSÕES

Através da metodologia ambientalmente amigável proposta, utilizando-se um sistema composto por TCCA e etanol, foi possível realizar a síntese de quatro compostos inéditos os 4,7-bis-(arylselanilbenzo[*b*]furanil) benzo-2,1,3-tiadiazóis com rendimentos que variaram entre 45-78%. Cabe ressaltar que, apesar dos rendimentos dos produtos desejados estarem em uma faixa de moderados a bons, estas moléculas são bastante complexas e com alto impedimento estérico, o que pode estar diretamente associado com estes valores.

Além disso, estes compostos estão sendo caracterizados fotofisicamente utilizando UV-Vis, fluorímetro, ensaios de efeito solvatocrômico bem como outros testes, com intuito de utilizá-los posteriormente como marcadores biológicos.

#### 5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] BEHRA, A. K.; MAJUNDAR, P.; PATI, A.; PATRA, M.; BEHERA, R. K. **Chem. Rev.** 2014, 114, 2942.



- [2] PRASAD, Ch. D.; BALKRISHNA, S. J.; KUMAR, A.; BHAKUNI, B. S.; SHRIMALI, K.; BISWAS, S.; KUMAR, S. **J. Org. Chem.** 2013, 78, 1434.
- [3] BRYANT, J. J.; LINDNER, D. B.; BUNZ, F. H. U. **J. Org. Chem.** 2013, 78, 1038.
- [4] NETO, B. A. D.; LAPIS, A. A. M.; MANCILHA, F. S.; VASCONCELOS, I. B.; THUM, C.; BASSO, L. A.; DUPONT, **J. Org. Lett.** 2009, 9, 4001.