

SALÃO DE
INICIAÇÃO CIENTÍFICA
XXIX SIC
**UFRGS**
PROPESQ



múltipla 
UNIVERSIDADE
inovadora  inspiradora

| | |
|-------------------|--|
| Evento | Salão UFRGS 2017: SIC - XXIX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS |
| Ano | 2017 |
| Local | Campus do Vale |
| Título | Avaliação catalítica de ligantes pirazol-dba em reações de acoplamento Ullmann |
| Autor | GUILHERME RODRIGUES MACHADO |
| Orientador | ADRIANO LISBOA MONTEIRO |

Avaliação catalítica de ligantes pirazol-dba em reações de acoplamento Ullmann

Guilherme Rodrigues Machado, Adriano Lisboa Monteiro

Instituto de Química – LAMOCA - UFRGS

As reações de acoplamento cruzado catalisadas por complexos de paládio possibilitam a formação seletiva de ligações C-C e C-heteroátomo e vem sendo cada vez mais usadas na indústria farmacêutica. Apesar da alta eficiência dessa metodologia, o alto custo do metal e a necessidade de ligantes mais complexos podem limitar a sua aplicação. Por outro lado, o acoplamento de Ullmann catalisado complexos e sais de cobre é uma alternativa na formação de ligações C-heteroátomo (C-N, C-O, C-S, etc.), C-C, e C-Metal.¹ Através da adição dos ligantes, é possível superar as deficiências na atividade catalítica e utilizá-lo como rota principal de síntese mesmo quando a opção mais direta seria uma reação de acoplamento catalisada por paládio.

Sabendo que o cobre se complexa com a molécula de pirazol², o objetivo do presente trabalho é avaliar a atividade catalítica de ligantes pirazol-dba em reações de acoplamento Ullmann. Por exemplo, o ligante pydba possui em sua estrutura 2 moléculas de pirazol e tem uma estrutura propícia para se ligar ao metal. O ligante dba não possui em sua estrutura as moléculas de pirazol, porém neste ligante podemos avaliar a atividade catalítica do cobre diante apenas da carbonila insaturada, já estudada³, e assim avaliando a importância da atividade das moléculas de pirazol. Outros ligantes a base de pirazol e de carbonilas insaturadas serão sintetizados para avaliar a atividade catalítica na reação Ullmann. Metodologias testadas anteriormente pelo nosso grupo de pesquisa também serão estudadas para reprodução e aprimoramento dos testes dos ligantes⁴.

A metodologia utilizada para avaliação dos ligantes foi realizada em um tubo de Schlenk sob atmosfera inerte em que foram adicionados os reagentes 1-bromo-4-nitrobenzeno (1 mmol, 202 mg), 4-metóxfenol (1.5 mmol, 186 mg), CuI (0.05 mmol, 9.5mg), Carbonato de Césio (1.5 mmol, 488,7 mg), DMF desaerado (3 mL) e os respectivos ligantes (0.05 mmol). A reação manteve-se sob agitação constante por 24 horas a 110°C. Após 24 horas, retirou-se uma alíquota da mistura reacional para ser analisada por GC e GC-MS. Utilizou-se difeniléter como padrão interno no GC para avaliar os resultados das reações. As primeiras reações obtiveram rendimentos que variaram entre 57-60%.

¹ Beletskaya, P.; Cheprakov, A. V.; *Coordination Chemistry Reviews*, **2004**, *248*, 2337–2364.

² Trofimenko, S.; *Chem. Rev.*, **1972**, *72*, 5.

³ Zhang, Qi; Wang, D.; Wang, X.; Ding, Ke; *J. Org. Chem.*, **2009**, *74*, 7187.

⁴ Limberger, J.; Leal, B. C.; Back, D. F.; Dupont, J.; Monteiro, A. L.; *Adv. Synth. Catal.* **2012**, *354*, 1429 – 1436.