



Seminários Gerais em Química

Doutorando: Michell Nunes Lôpo

Orientador: Dr. Jamal Rafique Khan

Calcogenação regioseletiva de imidazo[2,1-*b*]tiazóis em condições sustentáveis, empregando KIO_3 como catalisador

Os organocalcogênios, compostos formados principalmente pelos elementos enxofre (S) e selênio (Se), estão presentes em uma variedade de moléculas de interesse biológico e vêm se mostrando como importantes intermediários em síntese orgânica, na química de novos materiais e na área de química medicinal. Uma dessas importantes classes de compostos, os imidazo[2,1-*b*]tiazóis, consistem em anéis de cinco membros fundidos contendo dois átomos de nitrogênio e um de enxofre, que estão presentes em muitos compostos bioativos. Algumas moléculas híbridas formadas na reação entre imidazo[2,1-*b*]tiazóis e grupamentos organocalcogênios são poucas estudadas, mas que possuem um grande potencial na síntese orgânica, pois envolvem a conversão de uma ligação C(*sp*²)-H para uma ligação C-Se ou C-S (reação de calcogenação). Como consequência, importantes avanços vêm sendo obtidos nos métodos de preparação desses compostos híbridos, inclusive por métodos mais sustentáveis. Tendo em vista a importância dessas transformações, experimentos foram realizados para definir as condições reacionais otimizadas envolvendo a reação do composto 6-fenil-2-metilimidazo[2,1-*b*]tiazol com disseleneto de difenila, que foram utilizados como substratos padrões na calcogenação. A condição ideal de reação foi alcançada empregando 20 mol% de KIO_3 como catalisador, 5 equivalentes molares de glicerol como aditivo oxidante, por um período de 6h a 110°C, fornecendo o produto esperado, 6-fenil-5-fenilselenil-2-metilimidazo[2,1-*b*]tiazol, com 76% de rendimento. Após o estudo de otimização da reação, procedeu-se a síntese dos materiais de partida, os imidazo[2,1-*b*]tiazóis com variedades estruturais, utilizando metodologia que emprega o uso de 2-aminotiazóis e α -bromoacetonas substituídas. Esse processo gerou nove imidazo[2,1-*b*]tiazóis substituídos, com bons rendimentos (69 a 84%). Os compostos sintetizados foram caracterizados por ressonância magnética nuclear de ¹H e ¹³C e serão posteriormente utilizados no escopo do trabalho, nas reações de calcogenação com disselenetos e dissulfetos de diorganoíla.

Palavras-chave: Química verde, imidazo[2,1-*b*]tiazol, organocalcogênios dicalcogenetos de diorganoíla.