

Calcogenação Direta da Ligação C(sp²)-H da Quinolina via Eletrossíntese ¹

Manoella de Lima ², Samuel Rodrigues Mendes ³,

¹ Vinculado ao projeto “Calcogenação Direta da Ligação C(sp²)-H de (Hetero)Arenos via Eletrossíntese”

² Acadêmico (a) do Curso de Licenciatura em Química – CCT – Bolsista PROBIC/UDESC

³ Orientador, Departamento de Química – CCT – samuel.mendes@udesc.br

Os compostos de organocalcogênios tem sido grande alvo de estudo devido a potencialidade biológica no tratamento de doenças como câncer, Alzheimer, Parkinson, diabetes e depressão (MARTINS, 2019). Apesar da importância do estudo e sintetização desses compostos, comumente a literatura aborda sínteses convencionais ou que empregam reagentes e catalisadores caros ou materiais de partida com elevada toxicidade, diante disso, a eletrossíntese tem se mostrado uma eficaz metodologia para sintetização de compostos contendo calcogênios uma vez que suas vantagens incluem o uso dos elétrons como reagentes, poucos passos de reação, condições moderadas de sínteses e materiais de partidas mais baratos e de menor toxicidade (MEIRINHO, 2019)

No presente trabalho, têm-se estudado a partir de (hetero)arenos as condições de eletrossíntese mais favoráveis para a calcogenação direta da ligação C(sp²)-H. O estudo parte da quinolina, um composto heterocíclico líquido em temperatura ambiente. Derivados quinolínicos possuem atividade biológica, atuando como antibactericidas, antimaláricas e antivirais (FERREIRA, 2021).

Anterior a tentativa de síntese, houve a preparação do disseleneto de difenila, a fonte de cacogênio para a eletrossíntese. O disseleneto de difenila foi produzido através da reação de Grignard utilizando selênio em pó, bromobenzeno e magnésio metálico. Outros materiais necessários para a execução das tentativas de síntese foram os eletrólitos, eletrodos e o solvente previamente destilado.

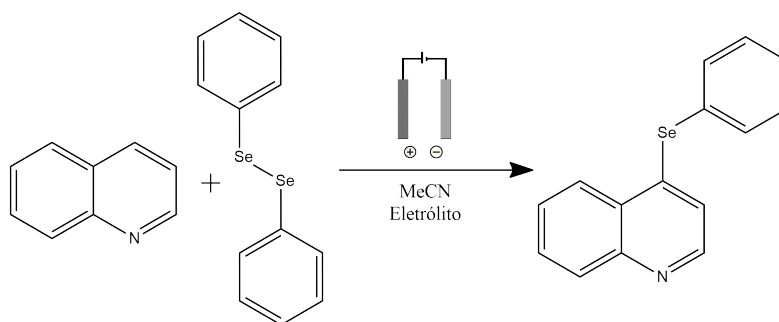


Figura 1 – Calcogenação da Quinolina através da eletrossíntese

A Figura 1 mostra a reação, de maneira direta, que se pretende obter ao variar individualmente parâmetros como eletrólito, quantidade e eletrólito, quantidade de material de partida e corrente elétrica. Até o presente momento, os eletrólitos utilizados foram KI (iodeto de potássio), NaI (iodeto de sódio), TBABF₄ (tetrafluoroborato de tetrabutilamonio) e TBAI (iodeto de tetrabutilamônio) em quantidades variadas de 0,12 mmol e 0,24 mmol. A corrente elétrica permaneceu contínua, configurada em valores de 20mA e 25mA, conforme valores experimentais

da literatura. Foram testadas condições experimentais usando eletrodos de carbono e platina, com combinações de eletrodos Pt|Pt, Pt|C e C|C. O volume de quinolina utilizado permaneceu de 0,3 mL, assim como o do solvente (acetonitrila) permaneceu em 5mL. Quanto ao disseleneto de difenila, foram utilizados 0,125 mmol.

Apesar das tentativas, ainda não se encontraram condições para a síntese da molécula alvo. As análises dos resultados experimentais foram realizadas utilizando ressonância magnética nuclear de hidrogênio e carbono (RMN ^1H e ^{13}C), onde observou-se apenas a presença majoritária do material de partida (quinolina). Já as análises feitas por meio de um cromatógrafo gasoso acoplado a um espectrômetro de massas igualmente mostraram apenas a presença da quinolina e do disseleneto de difenila, sem traços do produto desejado. Diante disso, estão sendo procuradas metodologias na literatura que sirvam de referência para buscar as melhores condições para que a síntese ocorra.

Palavras-chave: Organocalcogênios. Eletrossíntese. Quinolina.

Referências

FERREIRA, D. S. P.; MURIE, V. E.; SANTOS, T.; VIEIRA, P. C.; CLOSOSKI, G. C. Recentes Avanços na Funcionalização Seletiva de Quinolinas. **Química Nova**, v. 44, n. 5, 2021. Disponível em: <https://s3.sa-east-1.amazonaws.com/static.sites.sbq.org.br/quimicanova.sbq.org.br/pdf/RV2020-0426.pdf>. Acesso em: 12 ago. 2023.

MEIRINHO, A. G.; PEREIRA, V. F.; MARTINS, G. M.; SABA, S.; RAFIQUE, J.; BRAGA, A. L.; MENDES, S. R. Electrochemical Oxidative C(sp²)-H Bond Selenylation of Activated Arenes. **Eur. J. Org. Chem**, 2019. DOI doi.org/10.1002/ejoc.201900992. Disponível em: <https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/epdf/10.1002/ejoc.201900992>. Acesso em: 12 ago. 2023.

MARTINS, G. M.; MEIRINHO, A. G.; AHMED, N.; BRAGA, A. L.; MENDES, S. R. Recent Advances in Electrochemical Chalcogen (S/Se)-Functionalization of Organic Molecules. **ChemElectroChem**, v. 6, ed. 24, 2019. DOI doi.org/10.1002/celec.201901525. Disponível em: <https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/celec.201901525>. Acesso em: 19 ago. 2023.