

## **SÍNTESE DE ADUTOS DE MICHAEL UTILIZANDO CATALISADORES HETEROGÊNEOS**

**FERRO, Criscieli Taynara Barce** <sup>\*1(IC)</sup>, **SILVA, Caren Daniele Galeano da** <sup>1 (IC)</sup>, **ROCHA, Mariana Pompilio Darbem**<sup>1 (PG)</sup>, **SILVA, Amanda Roberta Pereira da**<sup>1 (IC)</sup>, **DAHMER, Carline Nayara**<sup>1 (PG)</sup>, **DOMINGUES, Nelson Luís de Campos**<sup>1 (PQ)</sup>

<sup>1</sup> LACOB - Laboratório de Catálise Orgânica e Biocatálise - Universidade Federal da Grande Dourados, Rodovia Dourados-Itahúm km 12 P.O.Box 533, CEP 79804-970 – Dourados-MS-Brasil.

E-mail:\* [criscielitaynara@hotmail.com](mailto:criscielitaynara@hotmail.com)\*, [carendaniele15@hotmail.com](mailto:carendaniele15@hotmail.com), [mari\\_pompilio5@hotmail.com](mailto:mari_pompilio5@hotmail.com), [amandaroberta\\_91@hotmail.com](mailto:amandaroberta_91@hotmail.com), [carline\\_mn@hotmail.com](mailto:carline_mn@hotmail.com), [nelsondomingues@ufgd.edu.com](mailto:nelsondomingues@ufgd.edu.com)

Palavras Chave: Reação de tio-Michael. Catálise híbrido. Zn[(Fen)(L-Pro)]Cl.

A reação de Michael é uma das reações mais utilizadas em síntese orgânica decorrente de sua facilidade de execução e por formar ligações C-C. Todavia, há variações desta e uma delas é a reação de tio-Michael a qual envolve um nucleófilo de enxofre. Este tipo de reação é muito importante, pois ligação C-S é encontrada em diversos compostos que apresentam, por exemplo, ação antibiótica, antimicrobiana, analgésica e anti HIV. Todavia, muitos esforços estão sendo voltados para a obtenção de adutos de tio-Michael estereosseletivos e para tanto diversos são os catalisadores utilizados para esse fim. Neste projeto inserimos dois novos catalisadores nas reações de tio-Michael, o Zn[(Fen)(L-Pro)]Cl e o Na[Zn(L-Pro)(Oxa)]. As reações de tio-Michael foram realizadas utilizando-se 1 eq. mol do acceptor de Michael e 1.2 eq. mol do sulfeto orgânico juntamente com 10% mol do catalisador Zn[(Fen)(L-Pro)]Cl ou Na[Zn(L-Pro)(Oxa)] em meio de refluxo de etanol por 3 horas. Através dos rendimentos obtidos, foi possível observar que o catalisador híbrido Zn[(Fen)(L-Pro)]Cl realizou a catálise de forma efetiva, já o catalisador Na[Zn(L-Pro)(Oxa)] gerava baixos rendimentos nas reações com cimaldeído e 2-ciclohexenona como eletrófilo, pois, durante a purificação dos adutos de tio-Michael pode-se observar a formação de subprodutos. No entanto, o catalisador Zn[(Fen)(L-Pro)]Cl proporcionava rendimentos mais elevados tanto nas reações com cinamaldeído quanto nas envolvendo 2-ciclohexenona como eletrófilo, pois, de acordo com a literatura a reação entre cinamaldeído e tiofenol necessita da presença de um catalisador para formar o aduto de tio-Michael, já a 2-ciclohexenona reage normalmente sem a presença de catalisador. Então foram realizados cálculos teóricos dos catalisadores usando B3LYP LANL2DZ a fim de explicar eficiência do catalisador Zn[(Fen)(L-Pro)]Cl. Os dados teóricos obtidos para o catalisador Zn[(Fen)(L-Pro)]Cl foi -0,24701 e para Na[Zn(L-Pro)(Oxa)] é -0,10384 eV. A energia LUMO para eles foram -0,01688 e -0,09032 eV., indicando uma baixa energia LUMO para o Zn[(Fen)(L-Pro)]Cl que está diretamente relacionado como sua elevada atividade catalítica, além disso, a carga Mülliken de zinco para Zn[(Fen)(L-Pro)]Cl é 1,074 e para Na[Zn(L-Pro)(Oxa)] é 0,953, ou seja, o Zn[(Fen)(L-Pro)]Cl possui um caráter metálico mais elevado que o outro catalisador. Conclui-se que o Zn[(Fen)(L-Pro)]Cl atuou de forma efetiva na obtenção dos adutos de tio-Michael utilizando-se o refluxo e aprimorando os métodos sintéticos já existentes para estas reações.

CNPq, FUNDECT, UEMS, UFGD E LACOB