



ISOLAMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE PRODUTOS INESPERADOS OBTIDOS DURANTE A PREPARAÇÃO DE *N*-FENIL-3,4-DI(PIRAZOLIL)MALEIMIDAS

LIZIERO, Henrique Aparecido¹ (rickliziero@gmail.com); **TIRLONI, Bárbara**² (barbara.tirloni@ufsm.br);² **SCHWALM, Cristiane Storck**³ (cristianeschwalm@ufgd.edu.br)

¹Discente do curso de Licenciatura em Química da UFGD;

²Docente dos cursos de Química – UFSM;

³Docente dos cursos de Química – Bacharelado e Licenciatura da UFGD.

O pirazol é considerado um heterociclo privilegiado do ponto de vista da química medicinal, uma vez que as diversas atividades biológicas apresentadas por seus derivados lhes conferem inúmeras aplicações nas áreas farmacêutica e agroquímica. Além disso, a química de coordenação deste núcleo também vem sendo bastante explorada, lhe rendendo aplicações em catálise. Em nosso grupo de pesquisa, recentemente nos interessamos na síntese de derivados bis-pirazólicos simétricos através da reação entre a *N*-fenil-3,4-dicloro-maleimida com diferentes pirazóis em etanol sob refluxo, de acordo com procedimento adaptado da literatura. No entanto, observamos, no caso da reação com o pirazol, além da formação do produto de interesse, a formação de um subproduto minoritário previamente não descrito (**L1b**, 8% de rendimento), oriundo da substituição de um átomo de cloro do material de partida por um núcleo pirazólico e outro por um substituinte anilino. Já no caso da reação com 3,5-dimetilpirazol não foi possível obter o produto simétrico desejado, sendo isolados dois produtos inesperados: no primeiro deles (**L2a**, 17% de rendimento), houve a substituição de apenas um átomo de cloro do material de partida por um substituinte anilino, enquanto no segundo (**L2b**, inédito, 33% de rendimento) um dos átomos de cloro foi substituído por um grupo anilino e o outro por um 3,5-dimetilpirazol. A proposta de estrutura para estes produtos inesperados foi construída com base nas análises de espectrometria de massas (MS), espectroscopia de absorção na região do infravermelho (IV), ressonância magnética nuclear (RMN) de ¹H e ¹³C e difratometria de raios X em monocristal (esta última apenas para **L1b**). Considerando que anilina não foi utilizada como reagente em nenhum dos experimentos realizados, uma racionalização para a formação dos produtos anilinosubstituídos inclui a abertura do anel maleimida do material de partida nas condições reacionais, liberando uma molécula de anilina que atua como nucleófilo concorrente e leva à formação destes subprodutos. Uma inspeção visual simples indicou que **L1b** e **L2b** apresentam fluorescência quando irradiados sob luz ultravioleta ($\lambda=390$ nm) e, por esta razão, estudos mais aprofundados serão realizados para avaliar suas propriedades fotofísicas.

Palavras-chave: Pirazol, maleimida, anilina.

Agradecimentos: À Universidade Federal da Grande Dourados (UFGD) pela concessão de bolsa de iniciação científica (H.A.L.) e bolsa pesquisador ingressante (C.S.S.).