



ESTUDO SINTÉTICO DE DERIVADOS DE 2,1,3-BENZOSELENODIAZÓIS VIA REAÇÃO DE ACOPLAMENTO CRUZADO C-S UTILIZANDO Ni (L-Pro)₂ COMO CATALISADOR

SANTOS, Estéfani Tayara Barce¹ (estefanibarce@hotmail.com), **FERRO, Criscieli Taynara Barce**² (criscielitaynara@hotmail.com), **CANTO, Augusto Screpanti Ferreira**¹ (matheusaugus@hotmail.com), **ANJOS, João Paulo Bejamin** (ioannespaulus17@gmail.com), **DOMINGUES, Nelson Luis de Campos**³ (nelsondomingues@ufgd.edu.br)

¹Discente do curso de Química da UFGD-Dourados;

²Discente do Programa de Pós-Graduação em Química da UFGD- Dourados;

³Docente do curso de Química da UFGD- Dourados.

Derivados de selenodiazóis representam uma classe de compostos orgânicos sintéticos de grande relevância biológica. Assim, alguns destes são utilizados como *building blocks* para a síntese de muitos compostos importantes. Dentre as atividades biológicas desse núcleo estão o potencial antitumoral, antioxidante e anti-inflamatório. Dada a importância dessa classe de compostos, realizamos a primeira reação de acoplamento cruzado C-S, afim de obter derivados de 2,1,3-benzoselenodiazóis usando Ni(L-Pro)₂ como catalisador. A reação foi realizada utilizando 5-bromobenzo[2,1,3]selenadiazol e benzenotiol na presença de 10% mol de Ni(L-Pro)₂, hidróxido de potássio (KOH), 4 mL de NMP em um período reacional de 6 horas à temperatura de 100 °C. Após a obtenção e confirmação do produto padrão via ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN ¹H), variou-se os substituintes presentes no tiol, a fim de se obter uma biblioteca de compostos. Ao alterar os substituintes obteve-se rendimentos variáveis dependendo da posição e influência do mesmo. Quando foram utilizados grupos doadores de elétrons nas posições *-orto* e *-para* foram obtidos excelentes rendimentos reacionais, pois esses grupos tornam o átomo de enxofre mais nucleofílico favorecendo o acoplamento cruzado C-S. No entanto, ao utilizar esses mesmos grupos na posição *-meta* foi observado um decréscimo no rendimento reacional, ocasionado pelo desfavorecimento dessa posição. Ao utilizar grupos fracamente retiradores de elétrons como -Cl e -F não foi observado uma mudança significativa no rendimento reacional, entretanto ao utilizar grupos fortemente retiradores volumosos na posição *-orto* como o -COOEt foi observado um decaimento no rendimento ocasionado devido ao impedimento estérico desse grupo. Em resumo, desenvolvemos no Laboratório de Catálise Orgânica e Biocatálise (LACOB) uma metodologia inédita para a formação da ligação C-S com derivados de 2,1,3-benzoselenodiazol (BSD) sob aquecimento usando um catalisador heterogêneo de baixo custo, proporcionando rendimentos de moderados a excelentes sob condições reacionais brandas.