



## **APLICAÇÃO DO PERÓXIDO DE HIDROGÊNIO- UREIA (UHP) COMO AGENTE OXIDANTE ALTERNATIVO NA SÍNTESE DE 3-SELENIL-INDÓIS**

Julia Rosa Menezes<sup>1</sup>, Fabiola Caldeira dos Santos<sup>2</sup>, Juliano Alex Roehrs<sup>3</sup> e Juliano Braun de Azeredo<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Mestranda no Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal do Pampa, Uruguaiiana, RS, Brasil

<sup>2</sup> Discente do Curso de Farmácia, Universidade Federal do Pampa, Uruguaiiana, RS, Brasil

<sup>3</sup> Docente no Instituto Federal de Ciência e Tecnologia Sul-Riograndense, Pelotas, RS, Brasil

<sup>4</sup> Docente na Universidade Federal do Pampa, Uruguaiiana, RS, Brasil

e-mail primeiro autor- [juliamenezes.aluno@unipampa.edu.br](mailto:juliamenezes.aluno@unipampa.edu.br)

Na área da síntese orgânica há um interesse especial na busca por compostos que possuam possíveis propriedades biológicas e, dentre as inúmeras estruturas, tem-se os compostos organosselenilados e heterocíclicos, como é o caso dos 3-selenil-indóis. Normalmente, para realização da síntese desses compostos via selenilação direta do núcleo indólico há a necessidade de condições severas de reação, como a utilização de catalizadores metálicos, longos tempos reacionais, altas temperaturas e até mesmo o uso de oxidantes tóxicos, dificultando a ação do manipulador. Sendo assim, o peróxido de hidrogênio-ureia (UHP) vem emergindo como uma alternativa a estes oxidantes nocivos, pois evita que ocorra a formação de subprodutos geralmente associados ao uso do peróxido de hidrogênio aquoso, além disso, trata-se de um reagente sólido o que facilita sua manipulação. Neste contexto, o presente trabalho tem como objetivo a síntese do 3-selenil-indóis através da clivagem oxidativa da ligação Se-Se de disselenetos realizada pelo uso do UHP, visando obter as melhores condições reacionais e esclarecer dúvidas acerca do mecanismo reacional. A metodologia escolhida para realização deste trabalho consiste em colocar os materiais de partida em um tubo de ensaio munidos de uma barra de agitação magnética, aquecidos a uma temperatura pré estabelecida, em que a formação do produto é acompanhada por cromatografia em camada delgada, após o consumo dos materiais de partida e com a formação do produto desejado, é realizada uma extração utilizando diclorometano e água e posteriormente é realizado o isolamento do produto desejado através de cromatografia em coluna, no caso do 3-selenil-indóis, a eluição ocorre com uma mistura de hexano e acetato de etila (97:3). Primeiramente, foram realizados testes visando a obtenção das melhores condições para a formação do produto desejado, partindo da otimização do tempo, temperatura, solvente e quantidade de UHP chegou-se a melhor condição reacional que foi 4 horas de reação, em uma temperatura de 80 °C, utilizando 1 equivalente de UHP, 0,5 mmol de ácido acético como aditivo e acetonitrila como solvente, obtendo assim, rendimentos de até 90%. Sendo assim, os próximos estudos foram referentes ao controle do experimento, para elucidar a metodologia para obtenção do produto final, desta forma, foram realizadas três reações. A primeira foi realizada em atmosfera inerte, neste caso, em atmosfera de argônio para analisar a interferência dos gases atmosféricos na obtenção do produto final. Posteriormente, foi realizado um teste com BHT (hidroxitolueno butilado), que é um inibidor radicalar, afim de elucidar possibilidades sobre o mecanismo reacional. Por último, foi realizado um teste em ultrassom, para ver se este aumentaria o rendimento em um menor intervalo de tempo. Sendo assim, foi possível esclarecer algumas características reacionais para a síntese do 3-selenil-indóis, como a necessidade da realização da reação ocorrer em atmosfera aberta, pois os gases como nitrogênio, oxigênio e dióxido de carbono presentes possuem um impacto positivo na formação do produto. Além disso, o teste com a utilização do BHT mostrou que a reação não ocorre por via radicalar e por último o uso do ultrassom foi descartado, visto que o rendimento foi bastante similar, sendo de 85% nas mesmas 4 horas de

reação. Portanto, os testes realizados foram capazes de definir a condição ideal para a formação do 3-selenil-indóis em um rendimento bastante satisfatório, além disso, os três testes propostos para a elucidação do mecanismo reacional foram bastante esclarecedores e de acordo com o que se esperava no grupo de pesquisa.

**Agradecimentos:** UNIPAMPA, CAPES, CNPq, FAPERGS.

**Palavras-chave:** Selênio; Indol; Peróxido de Hidrogênio-Ureia.