



## Síntese de 3,5-diaril-4-(organosselanil) isoxazóis utilizando Oxone® como oxidante verde.

Stella Q. Fernandes<sup>\*,1</sup> (IC), Krigor B. Silva<sup>1</sup> (PG), Paola S. Hellwig<sup>1</sup> (PG), Gelson Perin<sup>1</sup> (PQ), Marcio S. da Silva<sup>1</sup> (PQ).  
\* stellaquadrosf@gmail.com

<sup>1</sup>Laboratório de Síntese Orgânica Limpa – LASOL, CCQFA, Universidade Federal de Pelotas – Campus Capão do Leão, 96010-900  
Palavras Chave: Organosselênio, Isoxazóis, Oxone®

### Introdução

Os isoxazóis caracterizam uma classe de heterocíclicos de grande importância, seus derivados possibilitam uma grande gama de aplicações.<sup>1</sup> Esta classe vem ganhando espaço na química sintética devido a seu potencial biológico e farmacêutico, destacando-se as atividades anti-inflamatórias, anticâncer e antivirais.<sup>2</sup>

Em paralelo a isso, moléculas contendo selênio, vem recebendo grande destaque na síntese orgânica, essas moléculas, apresentam diversas atividades biológicas e também podem ser utilizadas como intermediários sintéticos e catalisadores orgânicos. Dessa forma, a funcionalização de moléculas, como os heterocíclicos, com um ou mais átomos de selênio, podem representar mudanças, de forma positiva nas propriedades e na reatividade desses compostos, bem como por exemplo aumentar seus potenciais bioativos.<sup>1</sup>

Junto a isso, o uso do Oxone® como oxidante é amplamente explorado, já que ele apresenta grande estabilidade, baixo custo, solubilidade em água e baixa toxicidade. Este oxidante verde, vem sendo aplicado em várias reações, inclusive junto com espécies de selênio, como na selenometoxilação de alcenos.<sup>3</sup>

Dessa forma, este trabalho tem como objetivo realizar a síntese de 3,5-diaril-4-(organosselanil) isoxazóis utilizando Oxone® como oxidante a partir da reação de ciclização de 1,3-diarilprop-2-in-1-ona O-metil oxima e disselenetos de diorganoila.

### Resultados e discussão

Primeiramente, para encontrar a melhor condição reacional, foi realizado um estudo de otimização das condições reacionais. Neste estudo, foram avaliados parâmetros como a quantidade dos reagentes, diferentes oxidantes, solventes, temperatura e também o tempo reacional. Assim após a realização de vários testes, foi possível obter a melhor condição reacional, com o uso de 0,15 mmol de **1a**, 0,112 mmol de **2a**, 0,15mmol de Oxone® como oxidante, 3 ml de etanol como solvente da reação, a uma temperatura de 100°C pelo tempo reacional de 16h. Com a melhor condição em mãos, iniciou-se a variação do escopo reacional.

Onde primeiramente utilizou-se diferentes disselenetos, com substituintes doadores e retiradores de elétrons (**3b** e **3c**), bem como um grupo alifático, onde foi possível obter os produtos em excelentes rendimentos, apenas sendo observado um aumento no tempo reacional. Os produtos foram caracterizados por espectroscopia de RMN <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C e <sup>77</sup>Se e por espectrometria de massas.

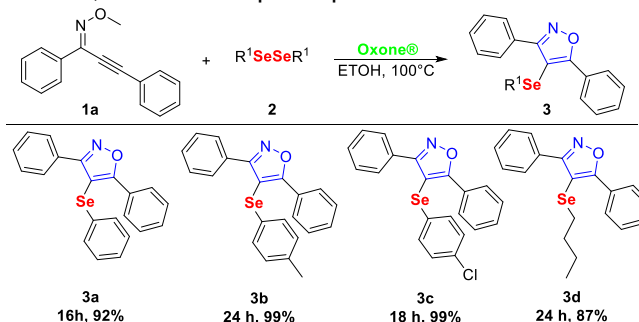


Figura 1. Variação do escopo reacional.

### Conclusões

Concluiu-se então que, é viável realizar a síntese de forma eficiente de 3,5-diaril-4-(organosselanil) isoxazóis a partir da reação de ciclização de 1,3-diarilprop-2-in-1-ona O-metil oxima e disselenetos de diorganoila promovida por Oxone®, obtendo-se até o presente momento 4 produtos com bons rendimentos e com tempos de reação variando de 5-24h. Pretende-se continuar o trabalho, e utilizar também diferentes oximas substituídas, aumentando assim o escopo reacional.

### Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERGS, FINEP e UFPel pelo apoio financeiro.

### Referências e notas

- (1) Wu, J.; Yang, Y.; Huang, X.; Gao, W.; Zhou, Y.; Liu, M.; Wu, H.; *ACS Omega*. **2020**, *5*, 23358-23363.
- (2) Yu, Z.; Zhang, D.; Li, X.; Zhang, B.; Yang, Z.; Qian, Y.; Du, Y.; *Asian J. Org. Chem.* **2021**, *10*, 3015-3019.
- (3) Goulart, H. A.; Neto, J. S. S.; Barcellos, A. M.; Barcellos, T.; Silva, M. S.; Alves, D.; Jacob, R. G.; Lenardão, E. J.; Perin, G.; *Adv. Synth. Catal.* **2019**, *361*, 3403-3411.