

Laura Maria Forain Miolo (IC), Tiago Lima da Silva (PG), Paulo Henrique Schneider (PQ)  
E-mail: paulos@iq.ufrgs.br

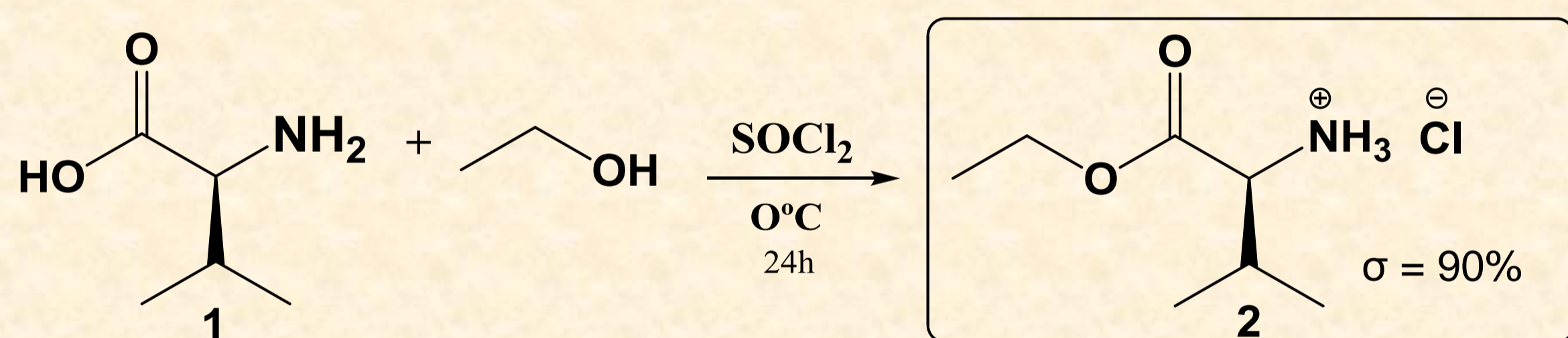
Laboratório de Síntese Orgânica e Materiais Inteligentes (LASOMI)  
Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre-RS.

## Introdução

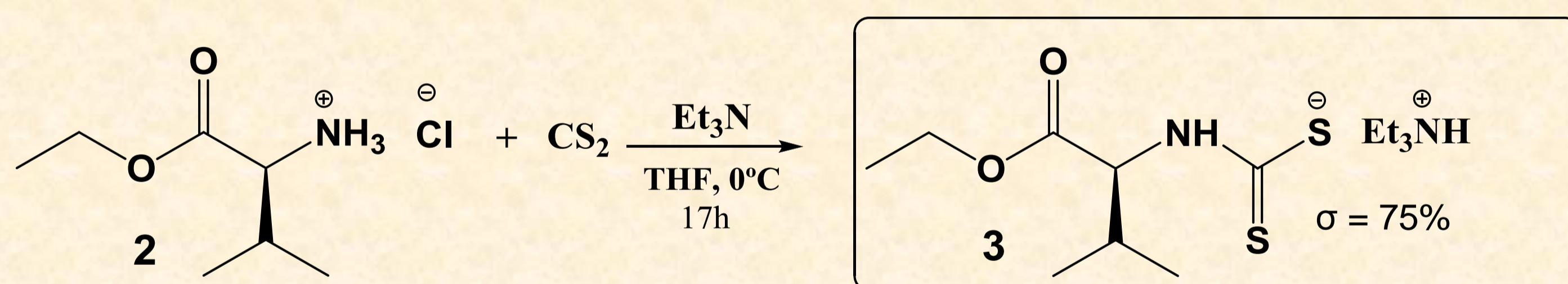
Os isotiocianatos são blocos de construção versáteis para a síntese de substâncias com potencial aplicação na química medicinal e catálise.<sup>1</sup> No campo da catálise, observa-se na literatura atual o crescente emprego de tiouréias quirais como organocatalisadores. Estas podem ser obtidas empregando-se isotiocianatos quirais agregando alto valor acadêmico e tecnológico, pois se trata de insumo enantioméricamente puro.<sup>2</sup> A literatura descreve a sua síntese a partir de compostos de alto valor comercial e potencialmente tóxicos. Neste contexto, a busca por rotas sintéticas versáteis utilizando compostos de baixa toxicidade é um apelo da química orgânica moderna frente aos problemas ecológicos atuais.<sup>2</sup> Neste trabalho, desenvolvemos e aperfeiçoamos a metodologia de síntese de isotiocianatos quirais a partir de ésteres de aminoácidos, em duas etapas, utilizando iodo molecular na reação chave.

## Resultados e Discussões

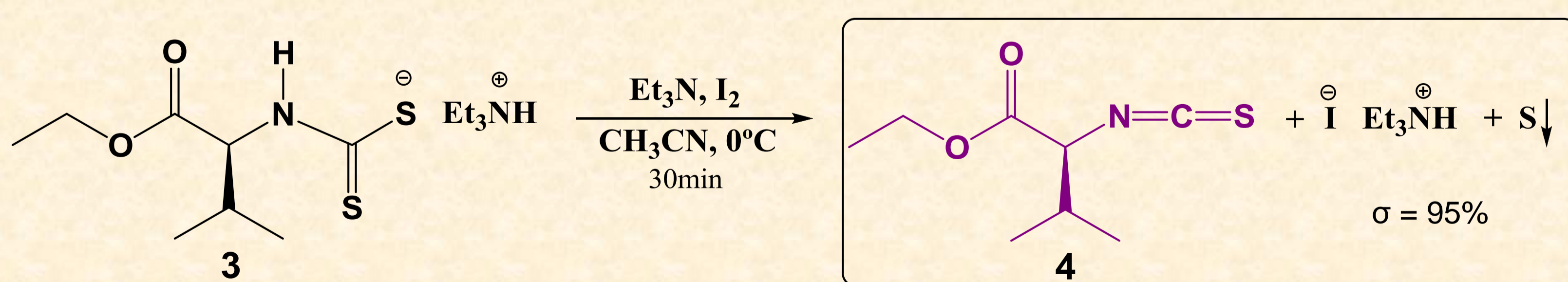
Para a obtenção dos compostos de interesse, planejamos uma rota sintética em duas etapas, utilizando reagentes de baixo custo e “ambientalmente amigáveis”. Desta forma, reagindo-se o éster etílico do aminoácido *L*-valina **2**, com dissulfeto de carbono e trietilamina, sob atmosfera inerte e banho de gelo, obteve-se o sal de ditiocarbamato **3**.<sup>3</sup> Na sequência, o composto **3** participa de uma reação de oxi-redução na presença de trietilamina e iodo, sob banho de gelo. O processo de purificação busca separar o enxofre precipitado da reação através de extração e filtração em de sílica. A análise inicial por espectroscopia infravermelho dos produtos **3** e **4**, bandas 1560cm<sup>-1</sup> e 2100 cm<sup>-1</sup>, são reveladoras do grupo tio-carbonyl e heteroaleno. O composto **4** é confirmado por RMN-C<sup>13</sup>, tendo destaque para o deslocamento em 150 ppm do carbono *sp*.



Esquema 1: Obtenção do éster etílico da *L*-valina.



Esquema 2: Obtenção do sal de ditiocarbamato.



Esquema 3: Obtenção do isotiocianato derivado da *L*-valina.

## Conclusões

A metodologia desenvolvida para a síntese do isotiocianato quiral **4** mostrou-se eficiente. O método está sendo otimizado para utilização de outros aminoácidos para obtenção de novos isotiocianatos quirais, assim colaborando para a literatura com um processo barato e limpo.

## Referências Bibliográficas

- Nath, J.; Ghosh, H.; Yella, R.; Patel, B. K.; *Eur. J. Org.* **2009**, 1849.
- Pinheiro, S.; Ferreira, V. F.; *Química Nova*, **1998**, 21(3), 312.
- Wong, R.; Dolman, S. J.; *J. Org. Chem.* **2007**, 72, 3969.

## Agradecimentos

