



# Atividade Catalítica de ligantes pirazol-dba em Reações de Acoplamento C-C



Vitória Silva Garcia, Mateus Emanuel Coldeira, Adriano Lisboa Monteiro  
Instituto de Química - Laboratório de Catálise Molecular (LAMOCA)- Prédio 43817  
Av. Bento Gonçalves 9500, Campus do Vale – Centro de Tecnologia - UFRGS  
airotiv.garcia@gmail.com

## INTRODUÇÃO

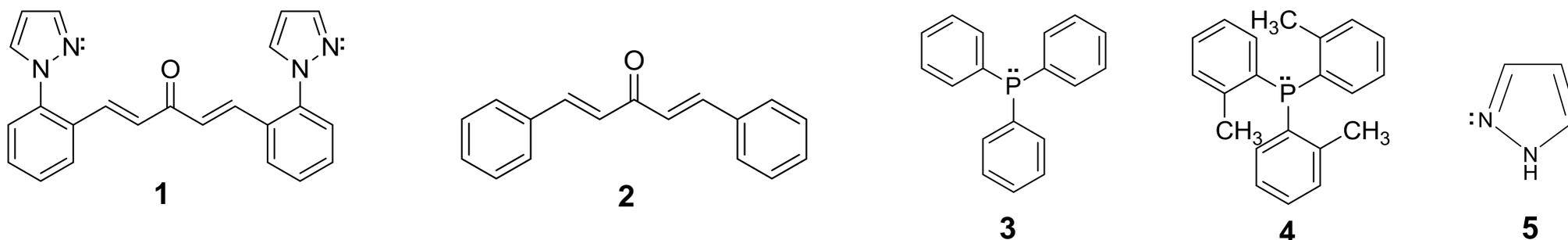
As reações de acoplamento catalisadas por paládio compreendem um dos métodos mais eficazes para a construção de ligações C-C e são amplamente utilizados em diferentes áreas de química, como na elaboração de produtos farmacêuticos, onde destaca-se as aplicações para o tratamento de doenças inflamatórias e respiratórias.<sup>3</sup> O uso de ligantes para aumentar a atividade catalítica nas reações de acoplamento C-C é muito comum e as fosfinas são imensamente usadas. Apesar da importância do uso das fosfinas, elas possuem alguns problemas na parte experimental que podem ser melhorados. Estes problemas, por exemplo, são: toxicidade, sensibilidade, manuseio, custo, etc.

Um ligante muito interessante é o ligante dba (**2**), os complexos de paládio contendo o ligando dibenzilideno acetona (dba) são amplamente utilizados como precursores catalíticos nas reações de acoplamento.<sup>1</sup> Na tentativa de substituir as fosfinas, utilizam-se ligantes à base de nitrogênio e o uso de ligantes à base de pirazol (**5**) para substituir o uso de fosfinas já foi utilizado e testado em vários estudos.<sup>2</sup>

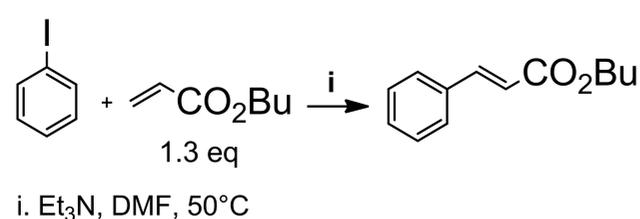
O objetivo é do presente trabalho é testar a atividade catalítica do ligante pirazol-dba (**1**) em reações de acoplamento C-C, unificando a química de pirazol com a capacidade do ligante dba, com a finalidade de comparar e substituir o uso de fosfinas.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os ligantes utilizados para os testes de atividade catalítica em reações de acoplamento C-C estão representados no esquema abaixo.

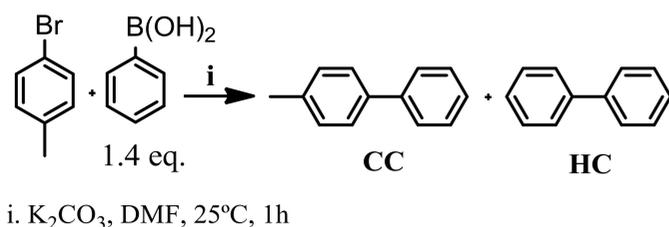


As reações testes utilizadas para avaliar a atividade catalítica do ligante estão apresentadas nos esquemas 1 e 2. Os sistemas catalíticos usados estão na base de 0,5 mol% de paládio e de ligante.



Sistemas	Rendimento (%)	
	15 min	60 min
Pd(OAc) <sub>2</sub>	18	77
Pd(OAc) <sub>2</sub> + <b>2</b>	24	76
Pd(OAc) <sub>2</sub> + <b>1</b>	34,5	83
Pd(OAc) <sub>2</sub> + <b>4</b>	38	94
Pd <sub>2</sub> (dba) <sub>3</sub>	1	3
Pd <sub>2</sub> (dba) <sub>3</sub> + <b>1</b>	2	6
Pd <sub>2</sub> (dba) <sub>3</sub> + <b>4</b>	12	43

Esquema 1: Reação Heck utilizada como teste para a avaliação da atividade catalítica do ligante pirazol-dba



Sistemas	Rendimento (%)	
	CC	HC
Pd(OAc) <sub>2</sub>	34,5	1,5
Pd(OAc) <sub>2</sub> + <b>2</b>	3	1,5
Pd(OAc) <sub>2</sub> + <b>1</b>	28	10
Pd(OAc) <sub>2</sub> + <b>3</b>	18	4
Pd <sub>2</sub> (dba) <sub>3</sub>	3	2
Pd <sub>2</sub> (dba) <sub>3</sub> + <b>1</b>	0	1
Pd <sub>2</sub> (dba) <sub>3</sub> + <b>3</b>	15	42

Esquema 2: Reação Suzuki utilizada como teste para a avaliação da atividade catalítica do ligante pirazol-dba

<sup>1</sup>M. C. Mazza, C. G. Pierpont, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.*, **1973**, 207

<sup>2</sup>X. Gai, R. Grigg, M.I. Ramzan, V. Srihdaran, *Chem. Commun.*, **2000**, 2053

<sup>3</sup>Thiel, O. R.; Achmatowicz, M.; Milburn, R. M.; *Synlett*, **2012**, 1564