

Alquilação seletiva na posição N1 de timina e uracil em sistema de Mitsunobu

Fábio D. P. Soares*, Edmilson C. de Siqueira, Sandra A. do Nascimento, Bogdan Doboszewski

Departamento de Química, Universidade Federal Rural de Pernambuco, R. Manoel de Medeiros s/n, Dois Irmãos, 52717-900, Recife, PE, Brazil.

RESUMO: Seletividade de alquilação na posição N1 em pirimidinas (timina e uracil) foi realizada pela aplicação de N3-benzoil timina e N3-benzoil uracil como substratos, onde o átomo N3 está temporariamente protegido, expondo o átomo N1 como sítio de alquilação. Os compostos N3-benzoiados foram obtidos pela dupla benzoilação nas posições N1 e N3, e hidrólise básica seletiva no átomo N1. Usando as condições de Mitsunobu ($iPrO_2CN=NCO_2iPr$, Ph_3P , ROH) as duas pirimidinas N3-benzoiadas foram reagidas com álcool alílico e álcool propagílico. Para evitar as dificuldades de purificação dos intermediários N3-benzoil-N1-alquilados, foi realizada hidrólise básica para remover o grupo N3-benzoil, pois isto facilita separação dos produtos finais e óxido de trifenilfosfina e $iPrO_2CNHNCO_2iPr$. N1-Alíl e N1-propargil timina e uracil são os substratos para as transformações futuras.

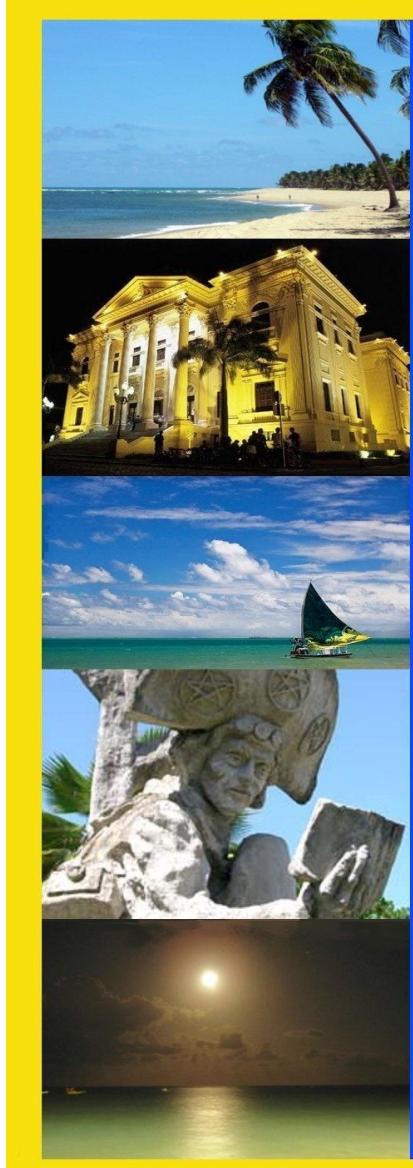
Palavras-Chave: alquilação; sistema de Mitsunobu; pirimidina; seletividade.

Selective alkylation at the N1 position of thymine and uracil in the Mitsunobu system

ABSTRACT: Selectivity of alkylation at the N1 position in pyrimidines (thymine and uracil) was achieved by the application of N3-benzoyl thymine and N3-benzoyl uracil as substrates, where the N3 atom was temporarily protected, exposing the N1 atom as the alkylation site. The N3-benzoylated compounds were obtained by double benzoylation at the N1 and N3 positions, and selective basic hydrolysis at the N1 atom. Using the Mitsunobu conditions ($iPrO_2CN=NCO_2iPr$, Ph_3P , ROH) both pyrimidines were reacted with allyl and propargyl alcohol. To avoid difficulties during purification of the N1-alkyl N3-benzoylated intermediates, basic hydrolysis was realized to remove the N3-benzoyl group, since this facilitates the separation of final products from triphenylphosphine oxide and $iPrO_2CNHNCO_2iPr$. N1-Allyl and -propargyl thymine and uracil are the substrates for future transformations.

Keywords: alkylation; Mitsunobu system; pyrimidine; selectivity

* Corresponding author. E-mail: fps006@hotmail.com



**III Workshop
Norte, Nordeste e
Centro-Oeste de
Síntese Orgânica**
Maceió, 25 a 26 de março de 2010

Tema:

Fronteiras da Síntese Orgânica

- Seminários
- Apresentação de Trabalhos Científicos
- Palestras com Pesquisadores Nacionais e Internacionais

Participe! Acesse o site abaixo e inscreva-se.
www.iqb.ufal.br/3wsoufal

Comissão Organizadora

Antônio Euzébio Goulart	IQB - UFAL
Carmem Lúcia de Paiva	IQB - UFAL
Dennis de Oliveira	IQB - UFAL
Marcelo Siqueira Valle	IQB - UFAL
Maria Cristina Caño	IQB - UFAL
Marília Oliveira Fonseca	IQB - UFAL
Silvia Helena Cardoso	IQB - UFAL- Campus Arapiraca

arte: juliaojunior@gmail.com

Conference website: <http://www.evento.ufal.br/3wsoufal/index.html>