

## 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 N-3 benzoilados foram obtidos pela dupla benzoilação nas posições N1 e N3, e hidrólise básica seletiva no átomo N1. Usando as condições de Mitsunobu ( $i\text{PrO}_2\text{CN}=\text{NCO}_2i\text{Pr}$ ,  $\text{Ph}_3\text{P}$ , ROH) as duas pirimidinas N3-benzoiladas foram reagidas com álcool alílico e álcool propargílico. 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  $i\text{PrO}_2\text{CNHNHCO}_2i\text{Pr}$ . N1-Alil 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 ( $i\text{PrO}_2\text{CN}=\text{NCO}_2i\text{Pr}$ ,  $\text{Ph}_3\text{P}$ , 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  $i\text{PrO}_2\text{CNHNHCO}_2i\text{Pr}$ . 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](mailto: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](http://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
Sílvia Helena Cardoso	IQB - UFAL - Campus Arapiraca










arte: juliaojunior@gmail.com

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