

3. Apresentação e Discussão dos Resultados

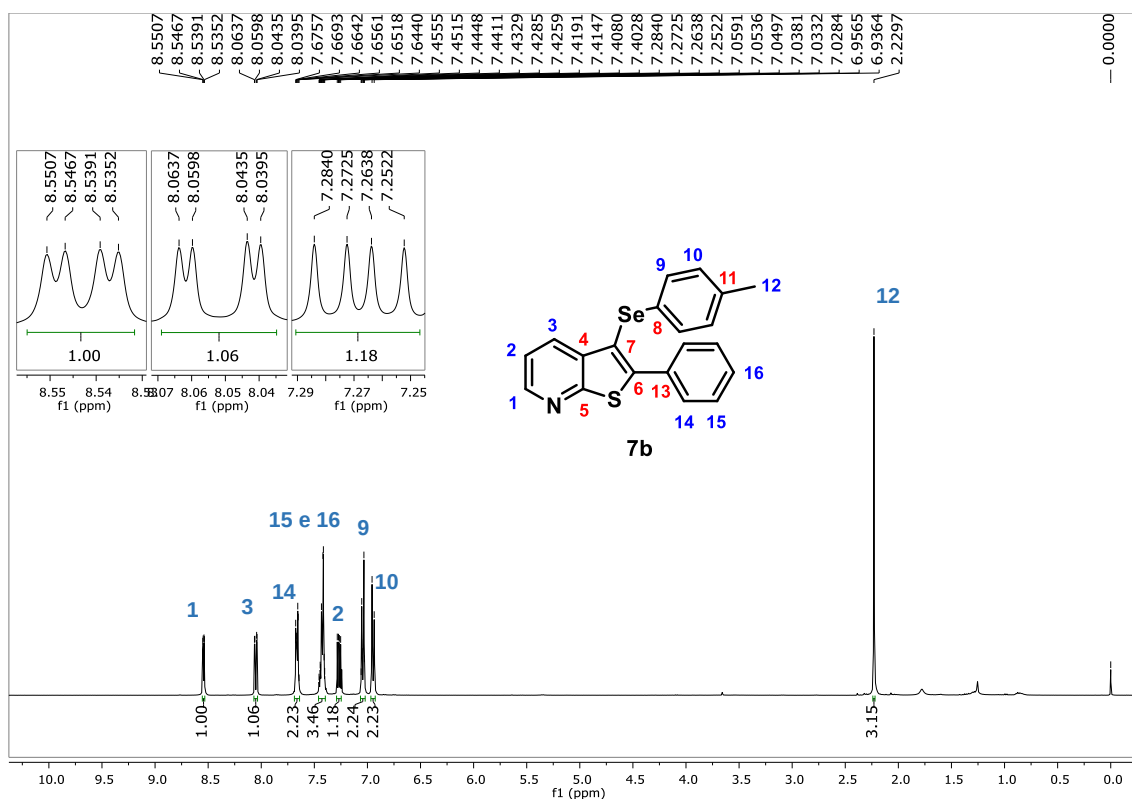


Figura 25. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do composto **7b**.

A Figura 26 ilustra o espectro de RMN ^{13}C do composto **7b**, o qual foi solubilizado em clorofórmio deuterado (CDCl_3) e submetido à um campo magnético de 9,4 T na frequência de 100 MHz. Analisando o espectro é possível observar 15 sinais referentes aos 20 carbonos da estrutura. O primeiro sinal observado em campo baixo, na região de 160,8 ppm corresponde ao carbono C-5, diretamente ligado aos átomos de nitrogênio e enxofre do núcleo tienopiridina. Seguido pelo carbono C-6 também ligado ao átomo de enxofre em 148,7 ppm. Em seguida, na região de 147,0 ppm observa-se o carbono C-1 presente no anel piridínico e diretamente ligado ao átomo de nitrogênio. Em 136,2 ppm pode ser observado o sinal do carbono C-11, seguido pelo carbono C-4 em 135,9 ppm e do carbono C-13 em 133,6 ppm. Na região de 132,4 ppm é observado o sinal correspondente ao carbono C-3 da piridina. Em 130,1 ppm é observado um sinal referente aos quatro carbonos quimicamente equivalentes C-14 da fenila e C-10 da toluíla. Já em 129,4 ppm são observados os demais carbonos quimicamente equivalentes C-9 da toluíla, seguido pelo carbono C-16 e os carbonos quimicamente equivalentes C-15 ligados à fenila em 129,1 e 128,3 ppm, respectivamente. Já em 128,1 ppm pode-se observar o sinal do carbono C-8 da

3. Apresentação e Discussão dos Resultados

toluila ligado diretamente ao átomo de selênio. Ainda, em 120,2 ppm é observado o sinal referente ao carbono C-2 da piridina e na região de 113,8 ppm observa-se o carbono C-7 presente no núcleo tienopiridina e ligado ao átomo de selênio. Com relação à região de campo alto do espectro, foi observado apenas um sinal da molécula, sendo este em 20,9 ppm referente ao carbono da metila C-12 presente no grupo toluila.

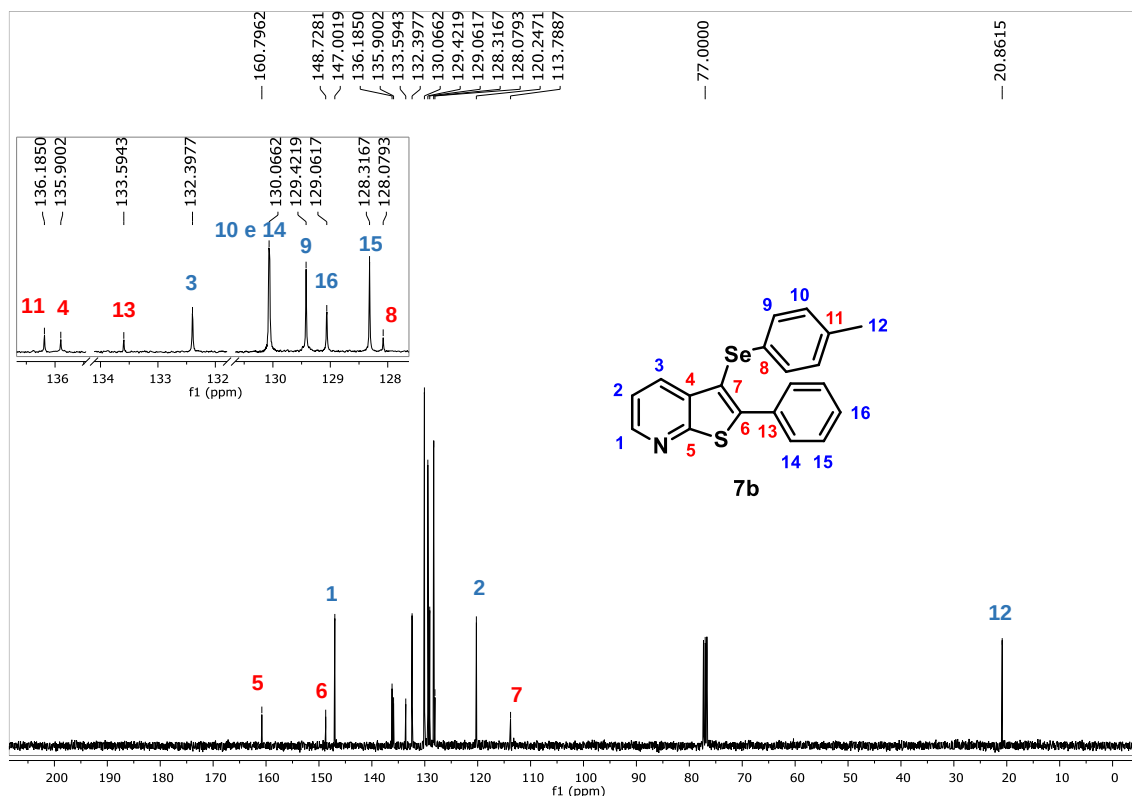


Figura 26. Espectro de RMN ^{13}C (100 MHz, CDCl_3) do composto **7b**.

Adicionalmente, também foram realizados experimentos de RMN em duas dimensões, além de DEPT-135 e ^{77}Se , a fim de confirmar as atribuições efetuadas a partir dos espectros de ^1H e ^{13}C . Desta forma, analisando o espectro de DEPT-135 do composto **7b** foi possível identificar o desaparecimento dos carbonos quaternários por comparação ao experimento de RMN ^{13}C (Figura 27). Neste experimento, ainda foi possível observar o desdobramento entre os respectivos sinais dos carbonos quimicamente equivalentes C-14 da fenila e C-10 da toluila na região de 130,1 ppm que, pela análise de RMN ^{13}C não foi possível.

3. Apresentação e Discussão dos Resultados

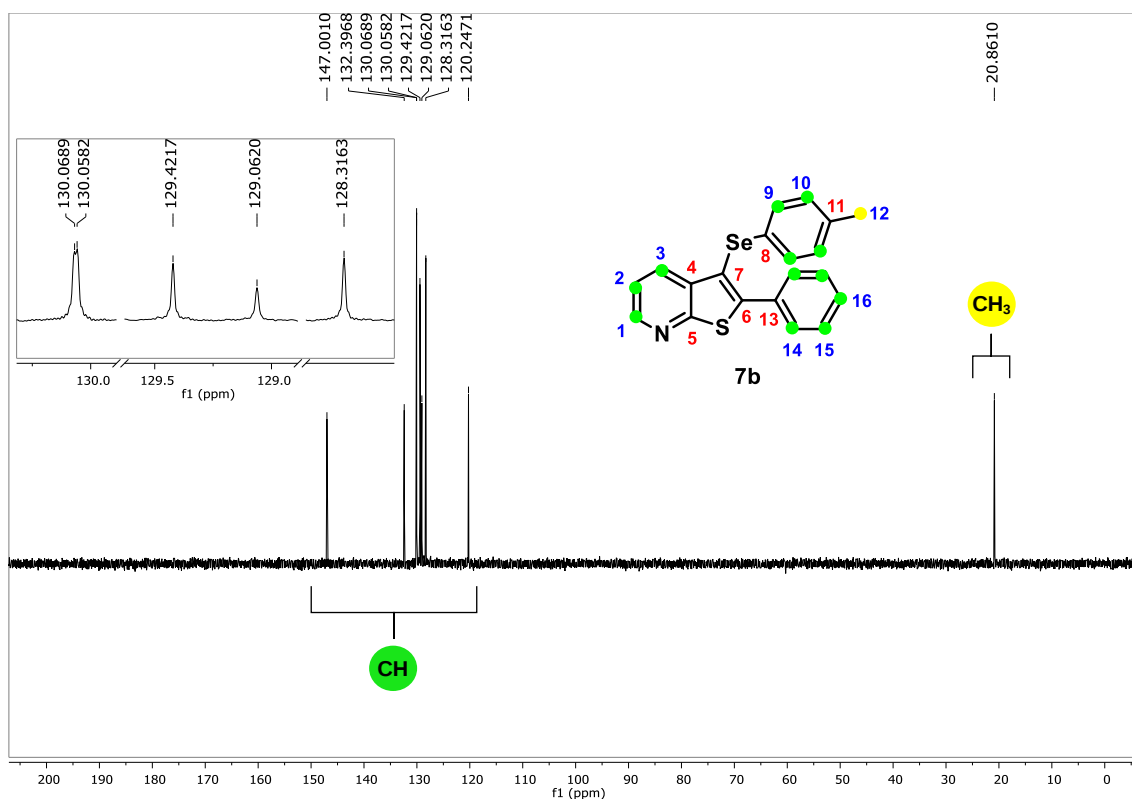


Figura 27. Espectro de RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl₃) do composto **7b**.

Os hidrogênios H-1, H-2 e H-3 ligados à piridina podem ser caracterizados de acordo com a literatura e por suas correlações entre si pelas constantes de acoplamento. Com essas informações, realizamos inicialmente o experimento de RMN ¹H-¹H-COSY (*Correlated Spectroscopy*). O COSY é uma técnica bidimensional homonuclear que indica o acoplamento entre núcleos de hidrogênio ligados até quatro ligações de distância. Os sinais obtidos, geralmente são oriundos de acoplamento entre hidrogênios vicinais, distantes a três ligações (³J). Assim, pode-se observar na Figura 28 que o hidrogênio H-3 apresenta uma correlação forte (³J) com o hidrogênio H-2 e correlação fraca (⁴J) com o hidrogênio H-1. Outra informação importante obtida a partir desta técnica foi a correlação fraca (⁴J) dos hidrogênios H-12 do grupo toluíla com os hidrogênios H-10, neste caso ainda foi possível verificar uma pequena correlação (⁵J) com os hidrogênios H-9 (Figura 29).

3. Apresentação e Discussão dos Resultados

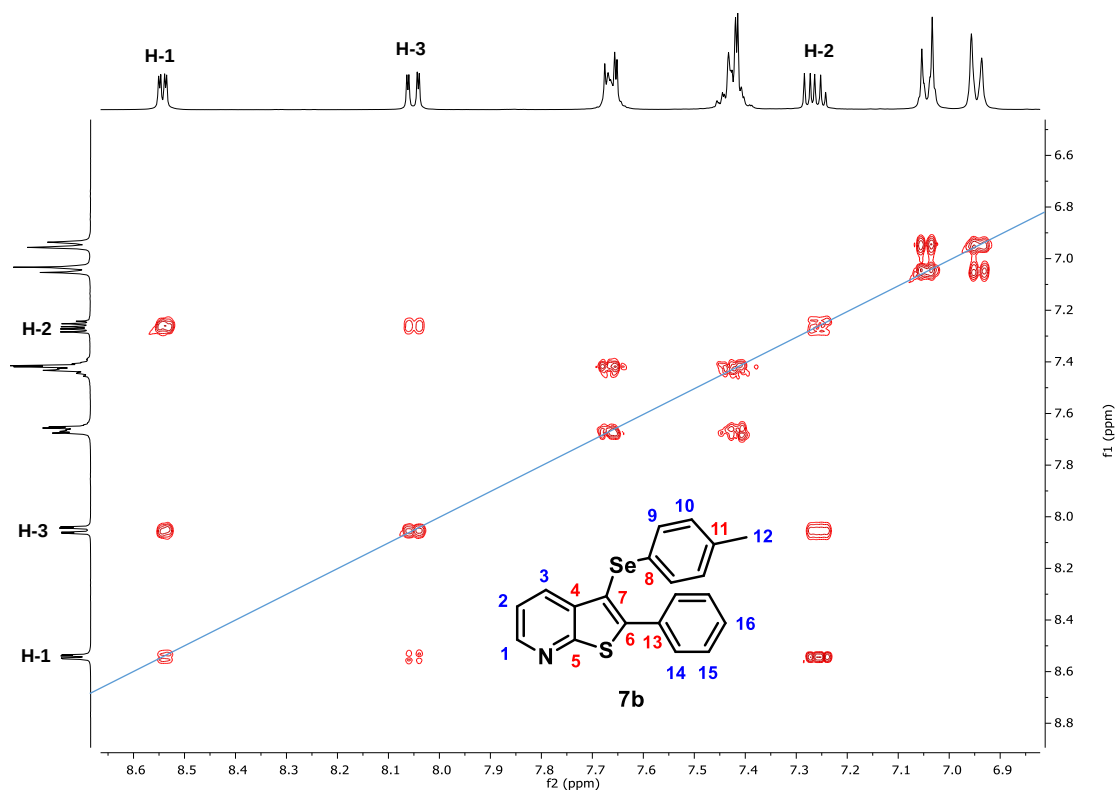


Figura 28. Expansão RMN-2D ^1H - ^1H -COSY (400 MHz, CDCl_3) do composto **7b**.

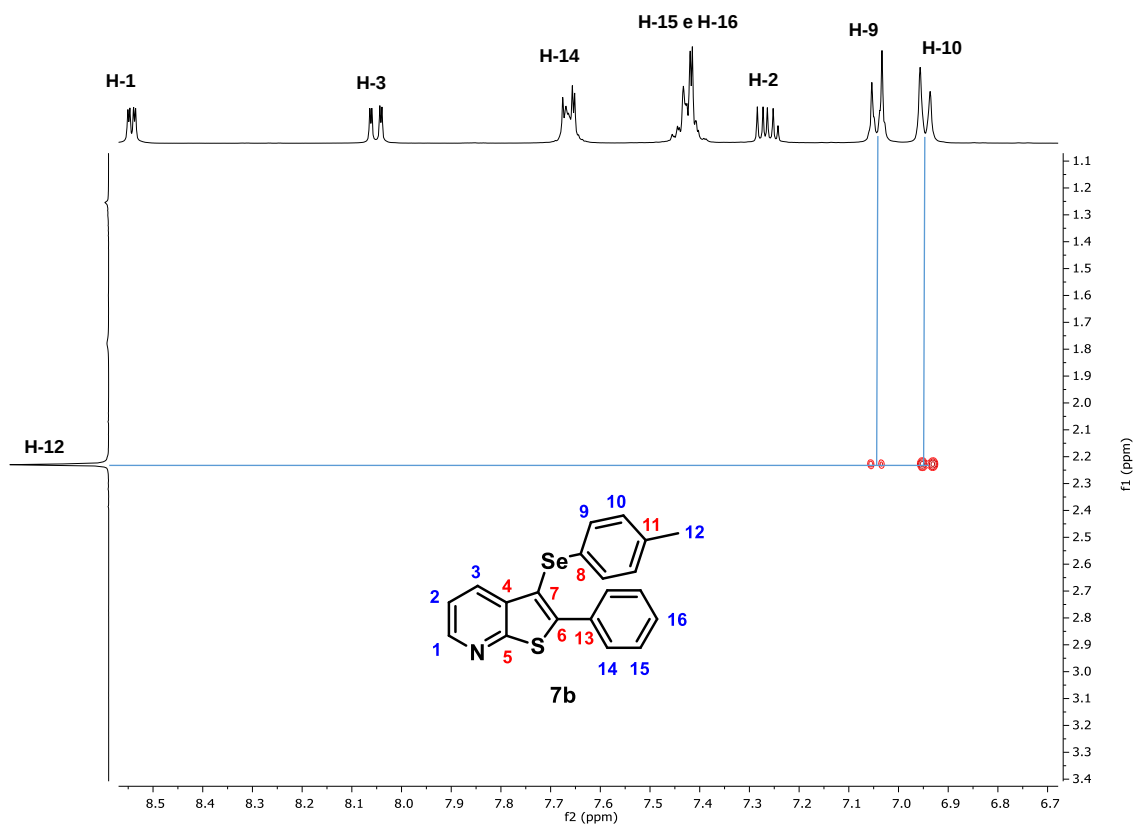


Figura 29. Expansão RMN-2D ^1H - ^1H -COSY (400 MHz, CDCl_3) do composto **7b**.

3. Apresentação e Discussão dos Resultados

Adicionalmente, foi realizado um experimento de RMN ^1H - ^{15}N -HMBC para verificar a correlação a três ligações (3J) ao átomo de nitrogênio. Por essa técnica, foi observado um sinal em 293,5 ppm referente ao nitrogênio presente na molécula, este apresentou uma correlação forte (3J) com o hidrogênio H-2 e, uma correlação fraca (2J) com o hidrogênio H-1 da piridina (Figura 30).

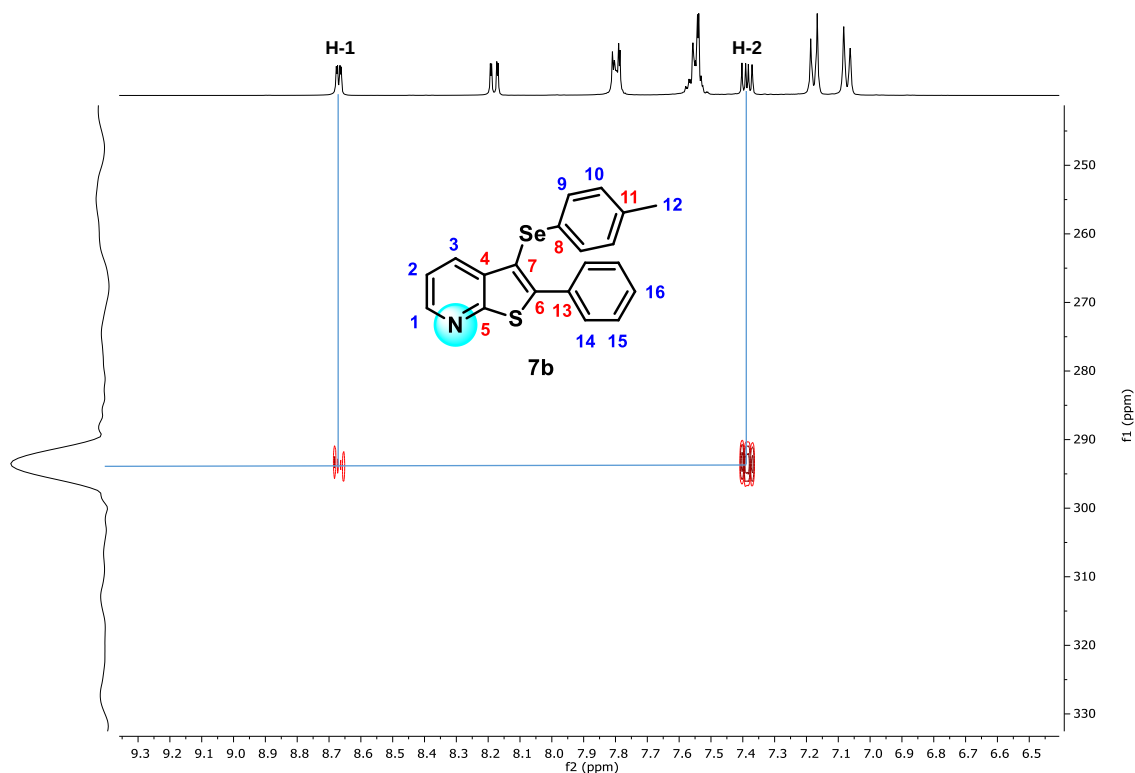


Figura 30. Expansão RMN-2D ^1H - ^{15}N -HMBC (400 MHz, CDCl_3) do composto **7b**.

Conhecendo-se a maioria dos hidrogênios presentes na molécula, os respectivos carbonos C-1, C-2, C-3, C-9, C-10 puderam ser determinados através do experimento de HSQC. Além disso, devido a intensidade do sinal pode-se atribuir os sinais referentes ao hidrogênio H-16 e o carbono C-16, que estão sobrepostos no espectro de hidrogênio ao possível sinal referente aos hidrogênios H-15 (Figura 31).

3. Apresentação e Discussão dos Resultados

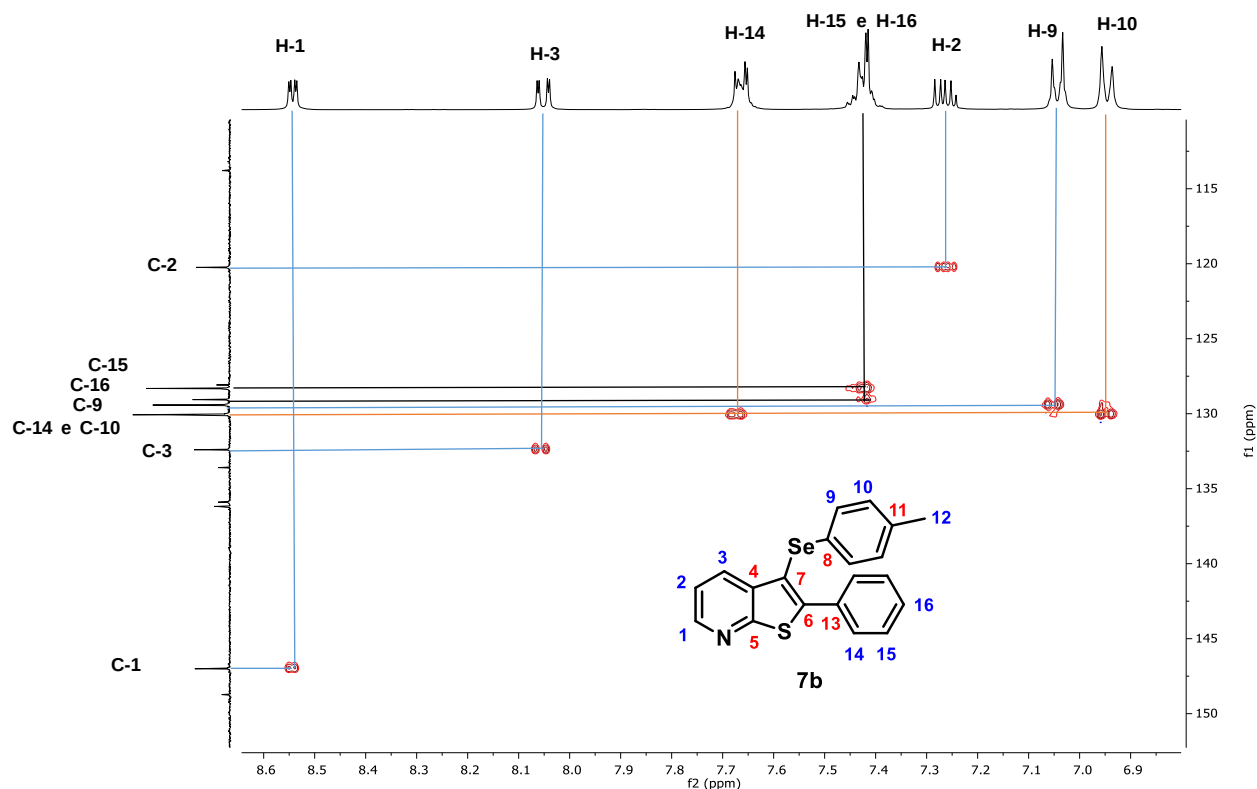


Figura 31. Expansão RMN-2D HSQC (400 MHz, CDCl_3) do composto 7b.

Partindo-se dos hidrogênios H-1 e H-3, através do experimento HMBC, foi observada uma correlação intensa (3J) do hidrogênio H-1 com os carbonos C-3 e C-5; e do hidrogênio H-3 com os carbonos C-1, C-5 e C-7 (Figura 32). Conhecendo-se o hidrogênio H-14 foi possível verificar a correlação intensa (3J) com o carbono C-6.

Na ampliação apresentada na figura 33, foi observada uma correlação intensa (3J) do hidrogênio H-2 com o carbono C-4 e uma correlação mais fraca (2J) com o carbono C-1. Partindo-se dos hidrogênios H-9 e H-10 ligados ao grupo toluíla observa-se uma correlação intensa (3J) do hidrogênio H-9 com o carbono C-11; e do hidrogênio H-10 com o carbono C-8. Ainda, observa-se uma correlação intensa (3J) dos hidrogênios H-15 com o carbono C-13.

3. Apresentação e Discussão dos Resultados

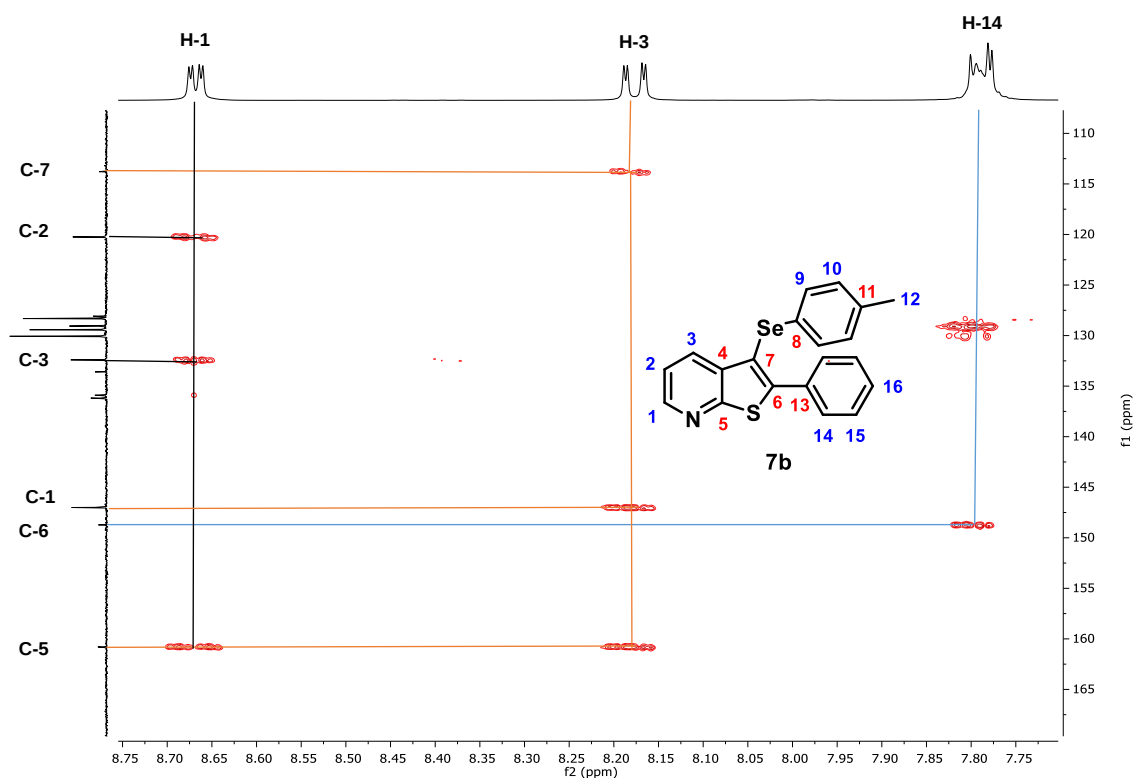


Figura 32. Expansão RMN-2D HMBC (400 MHz, CDCl_3) do composto **7b**.

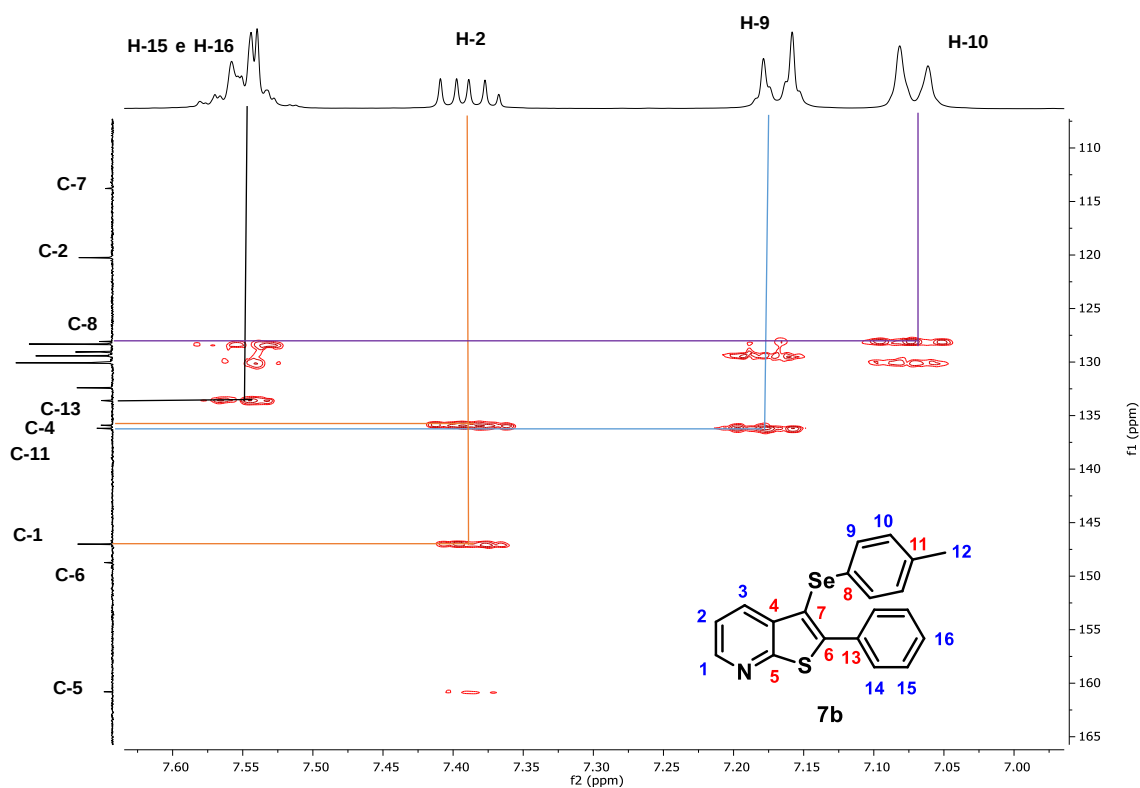


Figura 33. Expansão RMN-2D HMBC (400 MHz, CDCl_3) do composto **7b**.

3. Apresentação e Discussão dos Resultados

Ainda, a fim de complementar a elucidação do composto **7b** foi realizado um experimento de RMN ^{77}Se onde obteve-se um sinal em 256,6 ppm referente ao átomo de selênio da molécula (Figura 34).

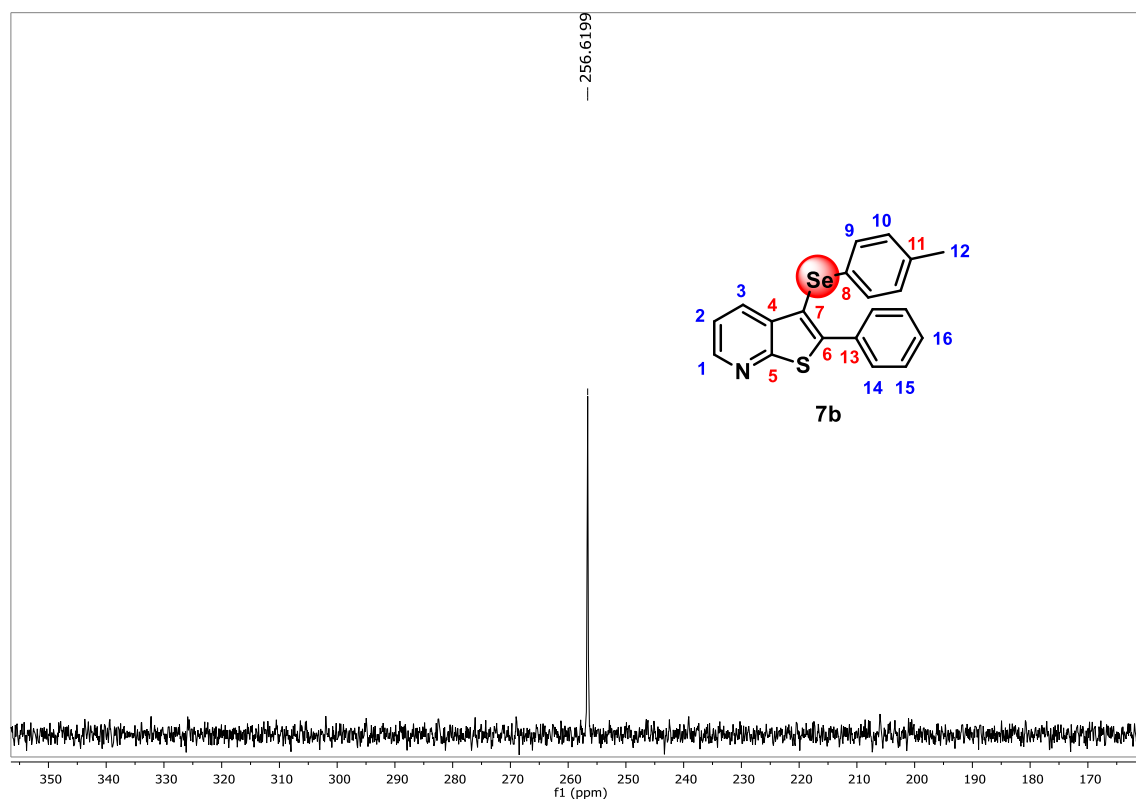


Figura 34. Espectro de RMN ^{77}Se (76 MHz, CDCl_3) do composto **7b**.

4. Considerações Finais

4. Considerações Finais

Com base no que foi proposto inicialmente, foi desenvolvida uma metodologia para a preparação de mono- ou bis(organosselanil)-1*H*-pirróis a partir de uma reação multicomponente promovida por ultrassom. Esta metodologia envolve inicialmente a reação de ciclocondensação de Paal-Knorr entre aminas primárias e a 2,5-hexanodiona. Este intermediário formado, reage com espécies eletrofílicas geradas *in situ* a partir da reação entre disselenetos de diorganoíla e CuI em DMSO. Através desta metodologia foram obtidos vinte e oito compostos inéditos na literatura, sendo que quatorze exemplos são da classe dos 3-(organosselanil)-1*H*-pirróis e os demais quatorze da classe dos 3,4-bis(organosselanil)-1*H*-pirróis. A seletividade na obtenção de cada classe de compostos é dependente da quantidade de catalisador de cobre e disseleneto de diorganoíla empregados nas reações. É importante destacar que se trata de uma metodologia que faz uso de uma fonte alternativa de energia como o ultrassom e, que proporcionou a obtenção de um grande escopo reacional, com rendimentos que variaram de moderados a excelentes. Este trabalho foi publicado no periódico internacional: *The Journal of Organic Chemistry* 2019, 84, 5471-5482.⁸²

Juntamente, foi desenvolvido um método para a síntese de 2-aril-(3-organocalcogenil)tieno[2,3-*b*]piridinas utilizando Oxone®. Esta estratégia envolve a reação de ciclização eletrofílica intramolecular de 3-(ariletinil)-2-(alquiltio)piridinas com espécies eletrofílicas de calcogênios geradas *in situ* a partir da reação entre dicalcogenetos de diorganoíla e Oxone® utilizando etanol como solvente a 78 °C em frasco aberto. Foram obtidos vinte e um compostos em bons a excelentes rendimentos. Este trabalho foi publicado no periódico internacional: *Asian Journal of Organic Chemistry* 2021, 10, 1198-1206.⁸³

⁸² Peglow, T. J.; da Costa, G. P.; Duarte, L. F.; Silva, M. S.; Barcellos, T.; Perin, G.; Alves, D. J. *Org. Chem.* **2019**, 84, 5471-5482.

⁸³ Peglow, T. J.; Bartz, R. H.; Barcellos, T.; Schumacher, R. F.; Cargnelutti, R.; Perin, G. *Asian J. Org. Chem.* **2021**, 10, 1198-1206.

5. Parte Experimental

5.1. Materiais e Métodos

5.1.1. Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN)

Os espectros de RMN ^1H , ^{13}C , DEPT-135, HMBC, HSQC e ^{77}Se foram obtidos em um espectrômetro de RMN Bruker Avance III HD, que opera na frequência de 400 MHz (Laboratório de RMN - Universidade Federal de Pelotas – UFPel – Pelotas – RS). Os deslocamentos químicos (δ) são reportados em parte por milhão (ppm) em relação ao padrão interno (TMS, utilizado como padrão interno para os espectros de RMN ^1H e CDCl_3 para os espectros de RMN ^{13}C /DEPT-135, já para os espectros de RMN ^{77}Se foi utilizado o disseleneto de difenila como padrão interno; $\delta = 463,0$ ppm em CDCl_3 , relativo ao Me_2Se $\delta = 0$ ppm e para os espectros de RMN ^{125}Te foi utilizado o ditelureto de difenila como padrão interno; $\delta = 422,0$ ppm em CDCl_3 , relativo ao Me_2Te $\delta = 0$ ppm). Colocando-se entre parênteses a multiplicidade (s = singleto, d = dubleto, dd = duplo dubleto, ddd = duplo duplo dubleto, t = tripleto, q = quarteto, quint = quinteto, sext = sexteto e m = multipletto), o número de hidrogênios foi obtido a partir da integral relativa e a constante de acoplamento (J) foi expressa em Hertz (Hz).

5.1.2. Espectrometria de massas de baixa resolução

Os espectros de massa (EM) de baixa resolução foram adquiridos em um cromatógrafo a gás acoplado a um espectrômetro de massas Shimadzu GCMS-QP2010 (Central Analítica – Centro de Ciências Química, Farmacêuticas e de Alimentos – Universidade Federal de Pelotas – UFPel – Pelotas – RS). Seus fragmentos estão descritos na relação entre unidade de massa molecular e sua carga (m/z), com sua abundância relativa expressa em porcentagem (%).

5.1.3. Espectrometria de massas de alta resolução

As análises de espectrometria de massas de alta resolução (EMAR) por ionização *eletrospray* (ESI-QTOF) foram realizadas em um instrumento Bruker Daltonics micrQTOF-Q II operando em modo positivo (Universidade de Caxias do Sul – UCS – Caxias do Sul – RS). As amostras foram solubilizadas em acetonitrila de grau *HPLC* e injetadas na fonte APCI por meio de uma seringa a uma taxa de fluxo de $5\ \mu\text{L}\ \text{min}^{-1}$. Os seguintes parâmetros do instrumento foram aplicados: as voltagens de capilar e cone foram ajustadas para +3500 V e -500

V, respectivamente, com uma temperatura de dessolvatação de 180 °C. Para a aquisição e processamento dos dados, utilizou-se o *software* Compass 1.3 para o micrOTOF-Q II (Bruker daltonics, USA). Os dados foram coletados na faixa *m/z* de 50-1200 à velocidade de duas varreduras por segundo.

5.1.4. Ponto de fusão

Os valores de ponto de fusão (P. F.) foram determinados em um aparelho Marte, modelo PDF III com precisão de 0,1 °C.

5.1.5. Solventes e reagentes

Os solventes foram purificados e secos antes de serem utilizados, conforme técnicas usuais.⁸⁴ Os solventes hexano, acetato de etila e diclorometano foram purificados através de destilação fracionada. Os reagentes restantes foram obtidos de fontes comerciais e utilizados sem prévia purificação. Os materiais de partida não disponíveis comercialmente ou de difícil aquisição utilizados foram sintetizados no Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos da UFPel, sendo que os reagentes necessários para as sínteses dos mesmos, foram obtidos comercialmente.

Os produtos foram purificados por cromatografia em coluna (CC), utilizando-se sílica gel 60 (230-400 mesh – MERCK) e, como eluente hexano ou uma mistura de hexano/acetato de etila, de acordo com as polaridades dos produtos obtidos. As placas de cromatografia em camada delgada (CCD) foram obtidas de fontes comerciais (Sílica G/UV₂₅₄ 0,20 mm). Utilizou-se, como método de revelação luz ultravioleta, iodo e solução ácida de vanilina.

5.1.6. Ultrassom

Para a realização da reação no ultrassom, foi utilizado um aparelho da marca Cole Parmer modelo CPX 130, com uma frequência de 20 KHz, e potência máxima de 130 W.

⁸⁴ Armarego, W. L. F. *Purification of Laboratory Chemicals*, 8th ed., Butterworth-Heinemann: Amsterdam, **2017**.

5.1.7. Difração de Raios-X em Monocristal

As coletas dos dados de difração de raios-X foram realizadas em um difratômetro Bruker D8 Venture equipado com um detector Photon 100, pertencente à Universidade Federal de Santa Maria, utilizando radiação de Mo-K α ($\lambda = 0,71073 \text{ \AA}$). A solução e o refinamento da estrutura foram realizados com o pacote de programa SHELX^{85,86}. As posições dos átomos de hidrogênio foram calculadas a partir das posições idealizadas. A estrutura molecular foi projetada com o programa Diamond.⁸⁷ Os arquivos com informações cristalográficas (CIF) dos compostos estudados foram depositados no Cambridge Crystallographic Data Center (CCDC) sob os números de identificação 2054144, 2054145 e 2054146, respectivamente. Esses dados podem ser obtidos gratuitamente no Cambridge Crystallographic Data Center em www.ccdc.cam.ac.uk.

5.2. Procedimentos Experimentais

5.2.1. Procedimento geral para a preparação do PdCl₂(PPh₃)₂⁸⁸

À uma suspensão de PdCl₂ (0,301 g; 1,7 mmol) em água (2,5 mL), adicionou-se NaCl (0,198 g; 3,4 mmol). A mistura foi aquecida de forma lenta e cuidadosa, em uma chapa de aquecimento, sob agitação até quase seca. Resfriou-se o sistema e adicionou-se água (2,5 mL) e repetiu-se a evaporação até a seca total do sistema. Em seguida, adicionou-se etanol (50 mL), aqueceu-se a 60 °C e adicionou-se PPh₃ (1,78 g; 6,8 mmol). Depois de 1-2 minutos formou-se um precipitado amarelo. Manteve-se a agitação por mais 2-3 minutos e filtrou-se a suspensão, lavou-se o sólido com duas porções de éter etílico (10 mL) e secou-se em bomba de alto vácuo.

5.2.2. Procedimento para preparação dos dicalcogenetos de diorganoíla 3.

Disselenetos de diarila: Em um balão reacional de 100 mL de duas bocas munido de agitação magnética e sob atmosfera de argônio, conectou-se um condensador de refluxo, adicionou-se magnésio metálico (0,75 g; 31 mmol), iodo

⁸⁵ Sheldrick, G. M. *Acta Crystallogr., Sect. C: Struct. Chem.* **2015**, 71, 3.

⁸⁶ Sheldrick, G. M. *Acta Crystallogr., Sect. A: Found. Crystallogr.* **2008**, 64, 112.

⁸⁷ Brandenburg, K. Diamond-Crystal and Molecular Structure Visualization, ver. 4.6.0; *Crystal Impact GbR*, Bonn, Germany, 1997-2019.

⁸⁸ Hartley, F. R. *Organometal. Chem. Rev. A.* **1970**, 6, 119-137.

e THF seco (5 mL). Em seguida, com a ajuda de um funil de adição de líquidos foram adicionados aproximadamente 17% de uma solução de brometo de arila (30 mmol) em THF seco (25 mL). Após alguns minutos de agitação (ou seja, após o desaparecimento da coloração do iodo, indicando o início da reação), foi adicionado gota a gota o restante da solução de brometo de arila, e mantido sob agitação até que praticamente todo o magnésio fosse consumido. Em seguida, substituiu-se rapidamente o funil de adição de líquidos por um de adição de sólidos, através do qual passou-se a adicionar selênio elementar (2,45 g; 31 mmol) em pequenas porções por um período de 30 minutos. Após o consumo de todo o selênio adicionou-se, cuidadosamente, uma solução saturada de cloreto de amônio (25 mL). Deixou-se o sistema aberto por 12 horas para que ocorresse a oxidação para dicalcogeneto de diorganoíla. O produto foi extraído do sistema reacional com acetato de etila (5x 50 mL), seco sobre sulfato de magnésio anidro e o solvente evaporado sob pressão reduzida. O produto, quando sólido, foi obtido puro após recristalização em hexano.

Disseleneto de dibutila: Em uma suspensão do selênio elementar (50 mmol) e THF (50 mL), adicionou-se lentamente $n\text{BuLi}$ (1,1 equiv) a $-78\text{ }^{\circ}\text{C}$. A mistura foi agitada durante 1 h à temperatura ambiente. Após este período, adicionou-se etanol e, após alguns minutos adicionou-se lentamente uma solução saturada de cloreto de amônio (25 mL) e a solução foi diluída com acetato de etila (30 mL). Agitou-se a mistura por 24 h em contato com o ar atmosférico. Posteriormente a fase orgânica foi separada e lavada com água (3 x 20 mL) e solução saturada de NaCl. A fase orgânica foi seca com MgSO_4 e o solvente evaporado sob pressão reduzida. O produto foi purificado por coluna cromatográfica de sílica gel utilizando hexano como eluentes.

Disseleneto de dipiridina: Em um balão reacional de 100 mL de duas bocas foi adicionado 2,4 mmol de selênio elementar, juntamente com 12 mL de PEG-400 (Polietilenoglicol), deixando sob atmosfera inerte (Ar) a $50\text{ }^{\circ}\text{C}$. Em seguida foi adicionado 4,4 mmol de NaBH_4 , levando aproximadamente 0,5 h para redução parcial do selênio, apresentando uma coloração clara. Em seguida foi adicionado 2 mmol de 2-cloropiridina, já solubilizada em 4 mL de PEG-400 com 4 mmol de ácido *p*-toluenossulfônico mono-hidratado. A reação ficou sob agitação magnética e a $50\text{ }^{\circ}\text{C}$ por 2 h. Após esse período adicionou-se, cuidadosamente, uma solução aquosa de bicarbonato de sódio 1% até a

neutralização completa do meio reacional e agitou-se a mistura por 0,5 h em contato com o ar atmosférico. Posteriormente foi realizada sua extração utilizando acetato de etila (20 mL), sendo a lavagem da fase orgânica realizada com água (3x 10 mL). A fase orgânica foi seca com sulfato de magnésio anidro, filtrada e o solvente evaporado sob pressão reduzida. O produto foi purificado por coluna cromatográfica de sílica gel utilizando hexano e acetato de etila como eluentes (97/3%).

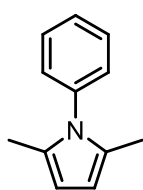
Disseleneto de tienila: Em um balão reacional de 100 mL de duas bocas munido de agitação magnética e sob atmosfera de argônio foi adicionado 10 mmol de tiofeno e 20 mL de THF. Em seguida, resfriou-se o sistema reacional e adicionou-se lentamente ⁿBuLi (1 equiv) a -78 °C. A mistura foi agitada durante aproximadamente 0,5 h e em seguida o sistema foi retornado à temperatura ambiente. Por fim, adicionou-se uma suspensão do selênio elementar (11 mmol) e a mistura foi agitada durante aproximadamente 1 h à temperatura ambiente. Após este período, adicionou-se etanol e, após alguns minutos adicionou-se lentamente uma solução saturada de cloreto de amônio (15 mL) e a solução foi diluída com acetato de etila (20 mL). Agitou-se a mistura por 0,5 h em contato com o ar atmosférico. Posteriormente a fase orgânica foi separada e lavada com água (3 x 20 mL) e solução saturada de NaCl. A fase orgânica foi seca com MgSO₄ e o solvente evaporado sob pressão reduzida. O produto foi purificado por coluna cromatográfica de sílica gel utilizando hexano como eluente.

Disseleneto de bis(2,2-dimetil-1,3-dioxolanilmetila): Em um balão reacional de 100 mL foi adicionado 2 mmol de selênio elementar, juntamente com 2 mL de THF, deixando sob atmosfera inerte (N₂) à temperatura ambiente. Em seguida foi adicionado 2 mmol de trietil boro-hidreto de lítio (2 mL de uma solução 1 M em THF), levando aproximadamente 0,5 h para redução parcial do selênio, apresentando uma coloração avermelhada. Em seguida foi adicionado 0,85 mmol do solketal tosilato, já solubilizada em 7,5 mL de THF. A reação ficou sob agitação magnética e à temperatura ambiente por 3,5 h. Após esse período adicionou-se, cuidadosamente, uma solução saturada de cloreto de amônio (5 mL) e agitou-se a mistura por 0,5 h em contato com o ar atmosférico. Posteriormente foi realizada sua extração utilizando diclorometano (20 mL), sendo a lavagem da fase orgânica realizada com água (3x 10 mL). A fase orgânica foi seca com sulfato de magnésio anidro, filtrada e o solvente evaporado

sob pressão reduzida. O produto foi purificado por coluna cromatográfica de sílica gel utilizando hexano e acetato de etila como eluentes (97/3%).

5.2.3. Procedimento para a síntese do 2,5-dimetil-1-fenil-1H-pirrol **13a**

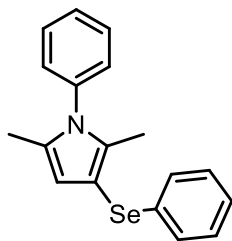
Em um tubo de ensaio de 10 mL adicionou-se anilina **1a** (1 mmol), 2,5-hexanodiona **2** (1 mmol) e DMSO (2 mL) sob atmosfera aberta. A reação foi submetida a irradiação ultrassônica com o auxílio de uma sonda (amplitude de 60%) por 10 minutos. O produto bruto obtido foi diretamente purificado em coluna cromatográfica em sílica gel utilizando hexano como eluente.



2,5-Dimetil-1-fenil-1H-pirrol 13a:³⁰ Rend.: 0,164 g (96%); Sólido branco; P.F. = 49-51 °C; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 7,46-7,35 (m, 3H); 7,21-7,18 (m, 2H); 5,90 (s, 2H); 2,03 (s, 6H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 139,0; 129,0; 128,7; 128,2; 127,6; 105,6; 12,9. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 129,0 (2x CH); 128,2 (2x CH); 127,6 (CH); 105,6 (2x CH); 12,9 (2x CH₃). EM (int. rel., %) *m/z*: 171 (86,2); 170 (100,0); 154 (15,6); 128 (11,8); 77 (27,8); 51 (17,3).

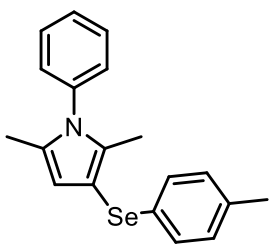
5.2.4. Procedimento geral para a síntese dos 3-(organosselanil)-1H-pirróis **4**

Em um tubo de ensaio de 10 mL adicionou-se a amina desejada **1a-j** (0,6 mmol), 2,5-hexanodiona **2** (0,6 mmol), o disseleneto de diorganoóla desejado **3a-g** (0,25 mmol), CuI (10 mol% - 0,0095 g) e DMSO (2 mL) sob atmosfera aberta. A reação foi submetida a irradiação ultrassônica com o auxílio de uma sonda (amplitude de 60%) por 0,5-3 horas (períodos alternados de 30 min). O produto bruto obtido foi diretamente purificado em coluna cromatográfica em sílica gel utilizando hexano como eluente.



2,5-Dimetil-1-fenil-3-(fenilselanil)-1H-pirrol 4a: Rend.: 0,131 g (80%); Óleo amarelado; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 7,50-7,40 (m, 3H); 7,29-7,17 (m, 6H); 7,13-7,09 (m, 1H); 6,102-6,10 (m, 1H); 2,09 (s, 3H); 2,04 (s, 3H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 138,9; 135,0; 134,1; 130,0; 129,2; 128,9; 128,3; 128,1; 128,07; 125,2; 113,0; 100,6; 12,9; 12,2. RMN DEPT-135

(100 MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 129,2 (2x CH); 128,9 (2x CH); 128,3 (2x CH); 128,1 (2x CH); 128,07 (CH); 125,2 (CH); 113,0 (CH); 12,9 (CH₃); 12,2 (CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 238,1. EM (int. rel., %) *m/z*: 327 (34,7); 247 (100,0); 170 (16,1); 77 (28,9). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₈H₁₈NSe [M+H]⁺: 328,0604; encontrada: 328,0614.



2,5-Dimetil-1-fenil-3-(4-tolilselanil)-1H-pirrol 4b: Rend.:

0,097 g (57%); Óleo amarelado; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz)

δ (ppm) = 7,43-7,32 (m, 3H); 7,16-7,11 (m, 4H); 6,95 (d, *J* =

7,9 Hz, 2H); 6,02-6,01 (m, 1H); 2,20 (s, 3H); 2,01 (s, 3H);

1,95 (s, 3H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) =

138,9; 135,0; 133,8; 131,0; 129,7; 129,4; 129,2; 128,8; 128,1; 128,0; 112,9;

101,1; 20,9; 12,9; 12,2. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 129,7 (2x

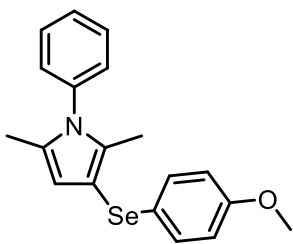
CH); 129,2 (2x CH); 128,8 (2x CH); 128,1 (2x CH); 128,0 (CH); 112,9 (CH); 20,9

(CH₃); 12,9 (CH₃); 12,2 (CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 232,1.

EM (int. rel., %) *m/z*: 341 (24,2); 261 (100,0); 170 (12,3); 77 (22,8). EMAR (APCI-

QTOF) massa calculada para C₁₉H₂₀NSe [M+H]⁺: 342,0761; encontrada:

342,0759.



3-[(4-Metoxifenil)selanil]-2,5-dimetil-1-fenil-1H-pirrol 4c:

Rend.: 0,114 g (64%); Óleo amarelado; RMN ¹H (CDCl₃,

400 MHz) δ (ppm) = 7,41-7,32 (m, 3H); 7,20 (d, *J* = 8,6 Hz,

2H); 7,13 (d, *J* = 7,4 Hz, 2H); 6,71 (d, *J* = 8,6 Hz, 2H); 6,00

(s, 1H); 3,68 (s, 3H); 2,02 (s, 3H); 1,94 (s, 3H). RMN

¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 158,1; 138,8; 133,4; 130,9; 129,3; 129,2;

128,1; 128,0; 124,6; 114,7; 112,7; 102,0; 55,3; 12,9; 12,2. RMN DEPT-135 (100

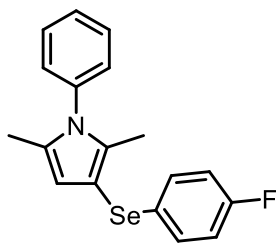
MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 130,9 (2x CH); 129,2 (2x CH); 128,1 (2x CH); 128,0 (CH);

114,7 (2x CH); 112,7 (CH); 55,3 (CH₃); 12,9 (CH₃); 12,2 (CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H}

(CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 228,2. EM (int. rel., %) *m/z*: 357 (24,5); 277 (100,0);

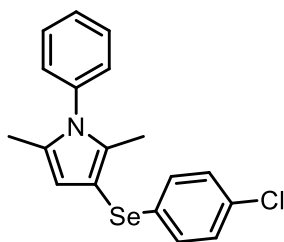
170 (9,9); 77 (21,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₉H₂₀NOSe

[M+H]⁺: 358,0710; encontrada: 358,0708.



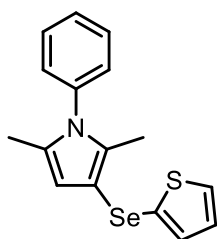
3-[(4-Fluorofenil)selanil]-2,5-dimetil-1-fenil-1H-pirrol 4d:

Rend.: 0,095 g (55%); Óleo amarelado; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,42-7,32 (m, 3H); 7,19-7,12 (m, 4H); 6,82 (t, J = 8,7 Hz, 2H); 6,00 (s, 1H); 2,00 (s, 3H); 1,95 (s, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 161,4 (d, J = 242,4 Hz); 138,7; 134,8 (d, J = 8,0 Hz); 133,8; 130,3 (d, J = 7,4 Hz); 129,6; 129,2; 128,11; 128,07; 115,9 (d, J = 21,4 Hz); 112,8; 101,1; 12,8; 12,2. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 130,3 (d, J = 7,4 Hz) (2x CH); 129,2 (2x CH); 128,11 (CH); 128,06 (2x CH); 115,9 (d, J = 21,4 Hz) (2x CH); 112,8 (CH); 12,8 (CH_3); 12,2 (CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 236,6. EM (int. rel., %) m/z : 345 (31,5); 265 (100,0); 170 (15,7); 77 (30,9). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{18}\text{H}_{17}\text{FNSe}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 346,0510; encontrada: 346,0511.



3-[(4-Chlorofenil)selanil]-2,5-dimetil-1-fenil-1H-pirrol 4e:

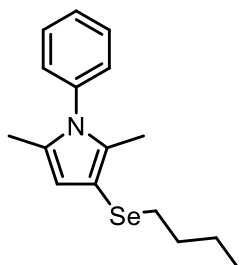
Rend.: 0,088 g (49%); Óleo amarelado; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,44-7,33 (m, 3H); 7,16-7,06 (m, 6H); 6,01-6,0 (m, 1H); 2,00 (s, 3H); 1,96 (s, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 138,7; 134,1; 133,4; 131,1; 129,7; 129,6; 129,3; 128,9; 128,2; 128,1; 112,8; 100,4; 12,9; 12,2. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 129,6 (2x CH); 129,3 (2x CH); 128,9 (2x CH); 128,2 (CH); 128,1 (2x CH); 112,8 (CH); 12,9 (CH_3); 12,2 (CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 241,0. EM (int. rel., %) m/z : 361 (46,9); 281 (100,0); 170 (25,5); 77 (44,9). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{18}\text{H}_{17}\text{ClNSe}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 362,0215; encontrada: 362,0208.



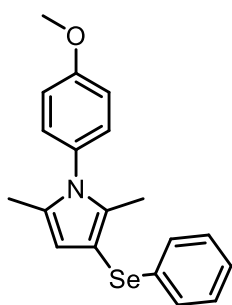
2,5-Dimetil-1-fenil-3-(tiofen-2-ilselanil)-1H-pirrol 4f:

Rend.: 0,060 g (36%); Sólido amarelo; P.F. = 69-70 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,47-7,38 (m, 3H); 7,27-7,26 (m, 1H); 7,18-7,16 (m, 2H); 7,14-7,13 (m, 1H); 6,92-6,90 (m, 1H); 6,11 (s, 1H); 2,16 (s, 3H); 1,98 (s, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 138,7; 132,8; 131,7; 129,2; 129,11; 129,08; 128,7; 128,1; 128,0; 127,7; 112,0; 103,8; 12,8; 12,3. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 131,7 (CH); 129,2 (2x CH); 128,7 (CH); 128,1 (2x CH); 128,0 (CH); 127,7

(CH); 112,0 (CH); 12,8 (CH₃); 12,3 (CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 179,2. EM (rel. int., %) m/z : 333 (10,1); 253 (68,1); 170 (11,5); 77 (100,0); 51 (54,7). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₆H₁₆NSSe [M+H]⁺: 334,0169; encontrada: 334,0173.

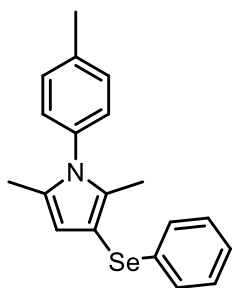


3-(Butylselanyl)-2,5-dimetil-1-fenil-1H-pirrol **4g:** Rend.: 14%; Óleo amarelado; Mistura dos compostos **4g** e pirrol **13a** (razão 1:3, respectivamente). Um asterisco denota os sinais referentes ao pirrol **13a**; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 7,46-7,35 (m, 3H); 7,21-7,16 (m, 2H); 6,04 (s, 1H); 5,90* (s, 2H); 2,65 (t, J = 7,4 Hz, 2H); 2,11 (s, 3H); 2,02* (s, 6H); 2,0 (s, 3H); 1,65 (quint, J = 7,4 Hz, 2H); 1,42 (sext, J = 7,4 Hz, 2H); 0,90 (t, J = 7,4 Hz, 3H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 139,0; 138,9*; 132,3; 129,0; 128,9*; 128,71; 128,65*; 128,2*; 128,1; 127,8; 127,5*; 112,5; 105,6*; 101,8; 32,4; 28,8; 22,8; 13,6; 12,9*; 12,7; 12,3. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 129,0 (2x CH); 128,9* (2x CH); 128,2* (2x CH); 128,1 (2x CH); 127,8 (CH); 127,5* (CH); 112,5 (CH); 105,6* (2x CH); 32,4 (CH₂); 28,8 (CH₂); 22,8 (CH₂); 13,6 (CH₃); 12,9* (2x CH₃); 12,7 (CH₃); 12,3 (CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 119,4. EM (int. rel., %) m/z : 307 (37,0); 250 (27,2); 171 (100,0); 170 (83,2); 77 (25,9). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₆H₂₂NSe [M+H]⁺: 308,0917; encontrada: 308,0906. Para determinar o rendimento da reação foi realizado um experimento de RMN ¹H utilizando 1,3,5-trimetoxibenzeno como padrão interno. Após etapas de extração para remoção do DMSO, foi adicionado à mistura bruta o padrão (10 mol% com relação à 0,5 mmol do produto **4g**) (Figura 182). Assim, o rendimento foi determinado pela relação mol/mol a partir das integrais relativas, por comparação entre os sinais do composto **4g** e do 1,3,5-trimetoxibenzeno (x10).

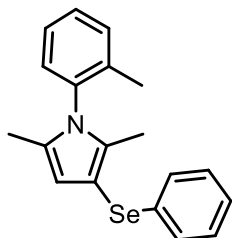


1-(4-Metoxifenil)-2,5-dimetil-3-(fenilselanyl)-1H-pirrol **4h:** Rend.: 0,164 g (92%); Óleo amarelado; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 7,20-7,17 (m, 2H); 7,13-7,00 (m, 5H); 6,92-6,88 (m, 2H); 6,003-6,001 (m, 1H); 3,78 (s, 3H); 2,00 (s, 3H); 1,95 (s, 3H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 159,1; 135,1; 134,3; 131,6; 129,8; 129,1; 128,8; 128,3; 125,1; 114,3;

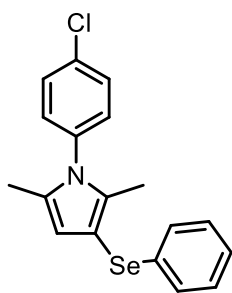
112,7; 100,2; 55,5; 12,8; 12,2. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 129,1 (2x CH); 128,8 (2x CH); 128,3 (2x CH); 125,1 (CH); 114,3 (2x CH); 112,7 (CH); 55,5 (CH₃); 12,8 (CH₃); 12,2 (CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 238,3. EM (int. rel., %) m/z : 357 (36,9); 277 (100,0); 200 (11,1); 107 (2,9); 77 (12,7). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₉H₂₀NOSe [M+H]⁺: 358,0710; encontrada: 358,0706.



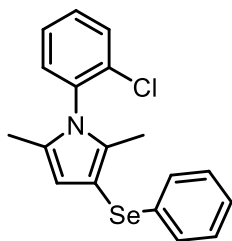
2,5-Dimetil-3-(fenilselanil)-1-(4-tolil)-1H-pirrol 4i: Rend.: 0,142 g (83%); Óleo amarelado; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 7,20-7,18 (m, 4H); 7,12-7,09 (m, 2H); 7,04-7,00 (m, 3H); 6,01 (s, 1H); 2,34 (s, 3H); 2,00 (s, 3H); 1,95 (s, 3H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 137,9; 136,2; 135,1; 134,1; 129,8; 129,5; 128,8; 128,3; 127,8; 125,1; 112,8; 100,3; 21,1; 12,9; 12,2. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 129,8 (2x CH); 128,8 (2x CH); 128,3 (2x CH); 127,8 (2x CH); 125,1 (CH); 112,8 (CH); 21,1 (CH₃); 12,9 (CH₃); 12,2 (CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 238,3. EM (int. rel., %) m/z : 341 (29,3); 261 (100,0); 184 (13,2); 91 (17,1); 77 (3,9). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₉H₂₀NSe [M+H]⁺: 342,0761; encontrada: 342,0758.



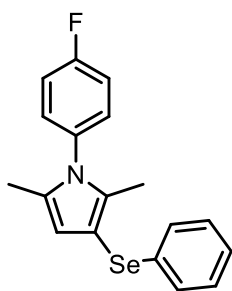
2,5-Dimetil-3-(fenilselanil)-1-(2-tolil)-1H-pirrol 4j: Rend.: 0,107 g (63%); Óleo amarelado; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 7,28-7,20 (m, 3H); 7,17-7,15 (m, 2H); 7,12-7,08 (m, 3H); 7,04-6,99 (m, 1H); 6,044-6,042 (m, 1H); 1,90 (s, 3H); 1,89 (s, 3H); 1,86 (s, 3H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 137,9; 136,7; 135,4; 133,7; 130,9; 129,0; 128,8; 128,7; 128,6; 127,9; 126,8; 125,0; 112,8; 100,1; 17,0; 12,4; 11,7. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 130,9 (CH); 128,8 (2x CH); 128,7 (CH); 128,6 (CH); 127,9 (2x CH); 126,8 (CH); 125,0 (CH); 112,8 (CH); 17,0 (CH₃); 12,4 (CH₃); 11,7 (CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 236,0. EM (int. rel., %) m/z : 341 (41,1); 261 (100,0); 184 (15,2); 91 (20,3); 77 (5,9). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₉H₂₀NSe [M+H]⁺: 342,0761; encontrada: 342,0762.



1-(4-Clorofenil)-2,5-dimetil-3-(fenilselanil)-1H-pirrol **4k:** Rend.: 0,108 g (60%); Óleo amarelado; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,37-7,34 (m, 2H); 7,19-7,17 (m, 2H); 7,11-7,05 (m, 4H); 7,03-6,99 (m, 1H); 6,01 (s, 1H); 1,99 (s, 3H); 1,94 (s, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 137,3; 134,8; 134,0; 133,8; 129,4; 129,3; 128,8; 128,4; 125,2; 113,4; 101,1; 12,8; 12,2. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 129,4 (2x CH); 129,3 (2x CH); 128,8 (2x CH); 128,4 (2x CH); 125,2 (CH); 113,4 (CH); 12,8 (CH_3); 12,2 (CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 239,3. EM (int. rel., %) m/z : 361 (43,1); 281 (100,0); 204 (10,0); 111 (21,0); 77 (8,7). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{18}\text{H}_{17}\text{ClNSe}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 362,0215; encontrada: 362,0208.

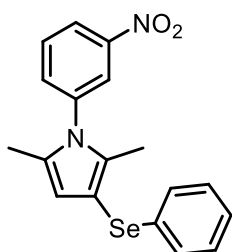


1-(2-Clorofenil)-2,5-dimetil-3-(fenilselanil)-1H-pirrol **4l:** Rend.: 0,090 g (50%); Óleo amarelado; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,51-7,47 (m, 1H); 7,37-7,30 (m, 2H); 7,28-7,23 (m, 1H); 7,18-7,15 (m, 2H); 7,12-7,09 (m, 2H); 7,04-7,00 (m, 1H); 6,052-6,051 (m, 1H); 1,94 (s, 3H); 1,91 (s, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 136,6; 135,1; 134,3; 133,7; 130,4; 130,0; 129,4; 128,9; 127,9; 127,7; 125,0; 113,1; 100,6; 12,4; 11,7. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 130,4 (2x CH); 130,0 (CH); 128,9 (2x CH); 127,9 (2x CH); 127,7 (CH); 125,0 (CH); 113,1 (CH); 12,4 (CH_3); 11,7 (CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 236,7. EM (int. rel., %) m/z : 361 (59,0); 281 (100,0); 204 (17,9); 111 (24,1); 77 (18,3). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{18}\text{H}_{17}\text{ClNSe}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 362,0215; encontrada: 362,0205.

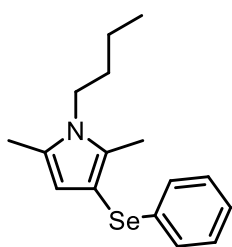


1-(4-Fluorofenil)-2,5-dimetil-3-(fenilselanil)-1H-pirrol **4m:** Rend.: 0,114 g (66%); Óleo amarelado; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,19-7,17 (m, 2H); 7,12-6,98 (m, 7H); 6,005-6,003 (m, 1H); 1,98 (s, 3H); 1,93 (s, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 162,0 (d, J = 246,6 Hz); 134,9; 134,8 (d, J = 3,2 Hz); 134,0; 129,7 (d, J = 8,6 Hz); 129,5; 128,8; 128,3; 125,2; 116,1 (d, J = 22,6 Hz); 113,1; 100,8; 12,8; 12,1. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 129,7 (d, J = 8,6 Hz) (2x CH); 128,8 (2x CH); 128,3 (2x

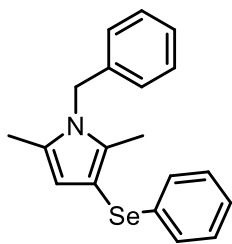
CH); 125,2 (CH); 116,1 (d, $J = 22,6$ Hz) (2x CH); 113,1 (CH); 12,8 (CH₃); 12,1 (CH₃). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 239,0. EM (int. rel., %) m/z : 345 (35,0); 265 (100,0); 188 (17,6); 95 (25,4); 77 (3,6). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₈H₁₇FNSe [M+H]⁺: 346,0510; encontrada: 346,0508.



2,5-Dimetil-1-(3-nitrofenil)-3-(fenilselani)-1H-pirrol 4n: Rend.: 0,093 g (50%); Óleo amarelo; RMN ^1H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 8,24 (ddd, $J = 8,1$; 2,1 e 1,1 Hz, 1H); 8,07 (t, $J = 2,1$ Hz, 1H); 7,63 (t, $J = 8,1$ Hz, 1H); 7,52 (ddd, $J = 8,1$; 2,1 e 1,1 Hz, 1H); 7,22-7,19 (m, 2H); 7,16-7,11 (m, 2H); 7,08-7,04 (m, 1H); 6,077-6,075 (m, 1H); 2,05 (s, 3H); 1,99 (s, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 148,7; 139,9; 134,4; 134,2; 133,7; 130,2; 129,3; 129,0; 128,6; 125,5; 123,2; 123,0; 114,2; 102,4; 12,9; 12,3. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 134,2 (CH); 130,2 (CH); 129,0 (2x CH); 128,6 (2x CH); 125,5 (CH); 123,2 (CH); 123,0 (CH); 114,2 (CH); 12,9 (CH₃); 12,3 (CH₃). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 240,9. EM (int. rel., %) m/z : 372 (32,8); 292 (100,0); 215 (4,8); 122 (1,6); 77 (8,6). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₈H₁₇N₂O₂Se [M+H]⁺: 373,0455; encontrada: 373,0437.



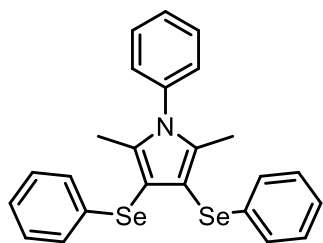
1-Butil-2,5-dimetil-3-(fenilselani)-1H-pirrol 4o: Rend.: 0,086 g (56%); Óleo amarelado; RMN ^1H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 7,18-7,12 (m, 4H); 7,09-7,04 (m, 1H); 5,97 (s, 1H); 3,79 (t, $J = 7,3$ Hz, 2H); 2,28 (s, 3H); 2,23 (s, 3H); 1,62 (quint, $J = 7,3$ Hz, 2H); 1,37 (sext, $J = 7,3$ Hz, 2H); 0,96 (t, $J = 7,3$ Hz, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 135,5; 132,8; 128,8; 128,1; 127,9; 124,9; 112,7; 99,4; 44,5; 32,9; 20,1; 13,8; 12,3; 11,4. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 128,8 (2x CH); 127,9 (2x CH); 124,9 (CH); 112,7 (CH); 44,5 (CH₂); 32,9 (CH₂); 20,1 (CH₂); 13,8 (CH₃); 12,3 (CH₃); 11,4 (CH₃). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 235,1. EM (int. rel., %) m/z : 307 (67,9); 227 (79,4); 185 (63,8); 150 (10,0); 108 (100,0); 77 (13,4). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₆H₂₂NSe [M+H]⁺: 308,0917; encontrada: 308,0920.



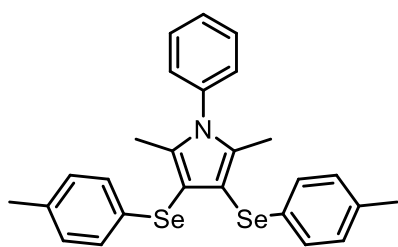
1-Benzil-2,5-dimetil-3-(fenilselanil)-1H-pirrol 4p: Rend.: 0,135 g (79%); Óleo incolor; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,33-7,14 (m, 7H); 7,10-7,06 (m, 1H); 6,90 (d, $J = 7,4$ Hz, 2H); 6,08 (s, 1H); 5,08 (s, 2H); 2,20 (s, 3H); 2,16 (s, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 137,8; 135,4; 133,6; 128,8; 128,0; 127,2; 125,5; 125,0; 113,2; 100,1; 47,7; 12,3; 11,4. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 128,8 (4x CH); 128,0 (2x CH); 127,2 (CH); 125,5 (2x CH); 125,0 (CH); 113,2 (CH); 47,7 (CH_2); 12,3 (CH_3); 11,4 (CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 236,4. EM (rel. int., %) m/z : 341 (10,7); 261 (19,8); 170 (5,7); 91 (100,0); 77 (10,7). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{19}\text{H}_{20}\text{NSe}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 342,0761; encontrada: 342,0755.

5.2.5. Procedimento geral para a síntese dos 3,4-bis(organosselanil)-1H-pirróis 5

Em um tubo de ensaio de 10 mL adicionou-se a amina desejada **1a-j** (0,5 mmol), 2,5-hexanodiona **2** (0,5 mmol), o disseleneto de diorganoóila desejado **3a-g** (0,5 mmol), CuI (15 mol% - 0,0142 g) e DMSO (2 mL) sob atmosfera aberta. A reação foi submetida a irradiação ultrassônica com o auxílio de uma sonda (amplitude de 60%) por 1-4 horas (períodos alternados de 30 min). O produto bruto obtido foi diretamente purificado em coluna cromatográfica em sílica gel utilizando uma mistura de hexano/acetato de etila (99:1) como eluente.

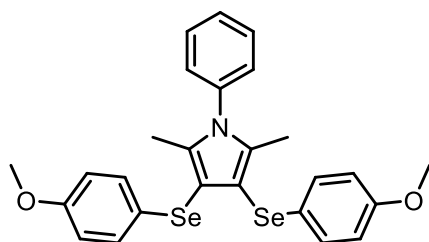


2,5-Dimetil-1-fenil-3,4-bis(fenilselanil)-1H-pirrol 5a: Rend.: 0,220 g (91%); Óleo amarelado; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,52-7,42 (m, 3H); 7,26-7,24 (m, 2H); 7,19-7,16 (m, 4H); 7,11-7,02 (m, 6H); 2,17 (s, 6H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 138,8; 135,4; 134,4; 129,4; 128,73; 128,67; 128,5; 127,9; 125,2; 109,3; 13,3. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 129,4 (2x CH); 128,73 (4x CH); 128,67 (4x CH); 128,5 (CH); 127,9 (2x CH); 125,2 (2x CH); 13,3 (2x CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 234,8. EM (int. rel., %) m/z : 483 (56,8); 326 (84,8); 246 (43,6); 170 (14,2); 77 (100,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{24}\text{H}_{21}\text{NSe}_2$ $[\text{M}]^+$: 483,0004; encontrada: 483,0010.



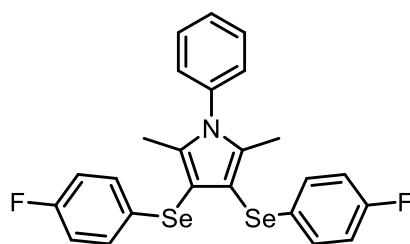
2,5-Dimetil-1-fenil-3,4-bis(4-tolilselanil)-1H-pirrol

5b: Rend.: 0,141 g (55%); Sólido amarelo; P.F. = 86-88 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,41-7,31 (m, 3H); 7,14-7,12 (m, 2H); 7,50 (d, J = 8,0 Hz, 4H); 6,81 (d, J = 8,0 Hz, 4H); 2,14 (s, 6H); 2,08 (s, 6H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 138,8; 135,0; 134,9; 130,5; 129,4; 129,3; 129,2; 128,4; 127,9; 109,7; 20,9; 13,2. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 129,4 (4x CH); 129,3 (2x CH); 129,2 (4x CH); 128,4 (CH); 127,9 (2x CH); 20,9 (2x CH_3); 13,2 (2x CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 228,3. EM (int. rel., %) m/z : 511 (57,6); 340 (100,0); 260 (38,1); 170 (12,2); 77 (67,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{26}\text{H}_{25}\text{NSe}_2$ $[\text{M}]^+$: 511,0317; encontrada: 511,0343.



3,4-bis[(4-Metoxifenil)selanil]-2,5-dimetil-1-fenil-1H-pirrol

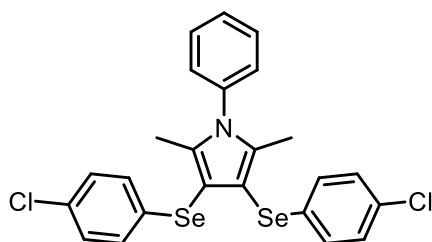
5c: Rend.: 0,160 g (59%); Sólido amarelado; P.F. = 104-106 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,41-7,32 (m, 3H); 7,18-7,12 (m, 2H); 7,07 (d, J = 8,5 Hz, 4H); 6,56 (d, J = 8,5 Hz, 4H); 3,63 (s, 6H); 2,09 (s, 6H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 158,0; 138,8; 134,7; 131,4; 129,3; 128,4; 127,9; 124,2; 114,4; 110,4; 55,1; 13,2. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 131,4 (4x CH); 129,3 (2x CH); 128,4 (CH); 127,9 (2x CH); 114,4 (4x CH); 55,1 (2x CH_3); 13,2 (2x CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 222,7. EM (int. rel., %) m/z : 543 (49,7); 356 (100,0); 276 (28,9); 170 (8,2); 77 (63,6). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{26}\text{H}_{25}\text{NO}_2\text{Se}_2$ $[\text{M}]^+$: 543,0216; encontrada: 543,0217.



3,4-bis[(4-Fluorofenil)selanil]-2,5-dimetil-1-fenil-1H-pirrol

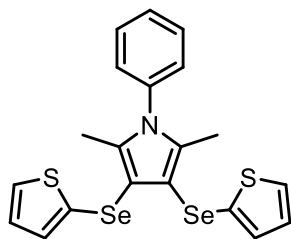
5d: Rend.: 0,117 g (45%); Sólido amarelado; P.F. = 118-120 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,43-4,34 (m, 3H); 7,16-7,14 (m, 2H); 7,06-7,03 (m, 4H); 6,70 (t, J = 8,8 Hz, 4H); 2,09 (s, 6H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 161,4 (d, J = 243,0 Hz); 138,6; 135,4; 130,9 (d, J = 7,6 Hz); 129,5; 128,6; 128,5 (d, J = 2,3 Hz); 127,9;

115,7 (d, $J = 21,5$ Hz); 109,7; 13,2. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 130,9 (d, $J = 7,6$ Hz) (4x CH); 129,5 (2x CH); 128,6 (CH); 127,9 (2x CH); 115,7 (d, $J = 21,5$ Hz) (4x CH); 13,2 (2x CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 232,2. EM (int. rel., %) m/z : 519 (67,4); 344 (95,0); 264 (47,8); 170 (14,4); 77 (100,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{24}\text{H}_{19}\text{F}_2\text{NSe}_2$ $[\text{M}]^+$: 518,9816; encontrada: 518,9814.



3,4-bis[(4-Clorofenil)selanil]-2,5-dimetil-1-fenil-1H-pirrol 5e: Rend.: 0,138 g (50%); Sólido amarelado; P.F. = 135-137 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,47-7,37 (m, 3H); 7,19-7,16 (m, 2H); 7,00-6,95 (m, 8H); 2,10 (s, 6H).

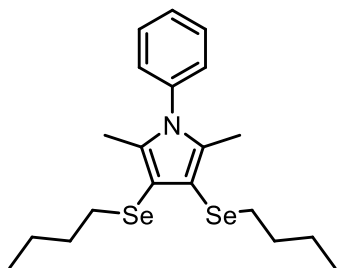
RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 138,6; 135,7; 132,5; 131,4; 130,2; 129,5; 128,75; 128,69; 127,9; 109,1; 13,2. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 130,2 (4x CH); 129,5 (2x CH); 128,75 (4x CH); 128,69 (CH); 127,9 (2x CH); 13,2 (2x CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 237,5. EM (int. rel., %) m/z : 551 (52,1); 360 (46,2); 325 (100,0); 280 (15,9); 170 (10,5); 77 (80,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{24}\text{H}_{19}\text{Cl}_2\text{NSe}_2$ $[\text{M}]^+$: 550,9225; encontrada: 550,9216.



2,5-Dimetil-1-fenil-3,4-bis(tiofen-2-ilselanil)-1H-pirrol 5f:

Rend.: 0,077 g (31%); Óleo amarelo; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,48-7,39 (m, 3H); 7,21 (dd, $J = 5,2$ e $1,1$ Hz, 2H); 7,17-7,14 (m, 2H); 7,12 (dd, $J = 3,5$ e $1,1$ Hz, 2H); 6,86 (dd, $J = 5,2$ e $3,5$ Hz, 2H); 2,20 (s, 6H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$

(CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 138,6; 134,4; 132,0; 129,34; 129,30; 128,5; 128,4; 128,0; 127,5; 111,1; 13,2. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 132,0 (2x CH); 129,30 (2x CH); 128,5 (2x CH); 128,4 (CH); 128,0 (2x CH); 127,5 (2x CH); 13,2 (2x CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 169,1. EM (rel. int., %) m/z : 495 (5,6); 332 (17,8); 252 (28,8); 77 (100,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{20}\text{H}_{18}\text{NS}_2\text{Se}_2$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 495,9211; encontrada: 495,9201.



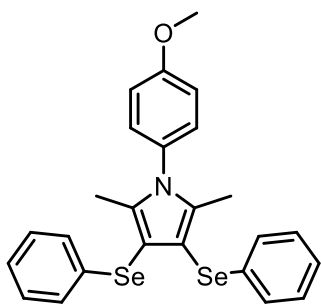
3,4-bis(Butilselanil)-2,5-dimetil-1-fenil-1H-pirrol 5g:

Rend.: 9%; Óleo amarelado; Mistura dos compostos **4g**, **5g** e pirrol **13a** (razão 5:2:2, respectivamente). Um

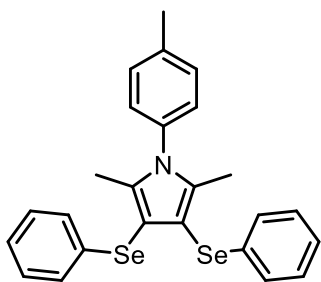
asterisco denota os sinais referentes ao pirrol **13a**.

Dois asteriscos denotam os sinais referentes ao composto **4g**. RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) =

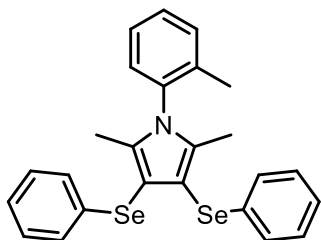
7,48-7,37 (m, 3H); 7,21-7,18 (m, 2H); 6,03** (s, 1H); 5,90* (s, 2H); 2,70 (t, $J = 7,4$ Hz, 4H); 2,65** (t, $J = 7,4$ Hz, 2H); 2,16 (s, 6H); 2,10** (s, 3H); 2,03* (s, 6H); 2,0** (s, 3H); 1,68-1,57 (m, 2H); 1,47-1,37 (m, 2H); 0,92-0,88 (m, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 139,2; 139,0**; 138,9*; 133,5; 132,3**; 129,2; 129,1**; 129,0*; 128,73**; 128,68*; 128,2*; 128,1**; 128,0; 127,8**; 127,5*; 112,5**; 109,2; 105,6*; 101,8**; 32,5**; 32,2; 29,1; 28,9**; 22,9; 22,8**; 13,64; 13,61**; 13,2; 12,9*; 12,8**; 12,3**. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 129,2 (2x CH); 129,1** (2x CH); 129,0* (2x CH); 128,2* (2x CH); 128,1** (2x CH); 128,0 (2x CH); 127,8** (CH); 127,5* (CH); 112,5** (CH); 105,6* (2x CH); 32,5** (CH_2); 32,2 (2x CH_2); 29,1 (2x CH_2); 28,9** (CH_2); 22,9 (2x CH_2); 22,8** (CH_2); 13,64 (2x CH_3); 13,61** (CH_3); 13,2 (2x CH_3); 12,9* (2x CH_3); 12,8** (CH_3); 12,3** (CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 119,3**; 110,7. EM (int. rel., %) m/z : 443 (49,2); 305 (26,0); 250 (70,2); 171 (100,0); 170 (56,4); 77 (37,5). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{20}\text{H}_{29}\text{NSe}_2$ $[\text{M}]^+$: 443,0630; encontrada: 443,0650. Para determinar o rendimento da reação foi realizado um experimento de RMN ^1H utilizando 1,3,5-trimetoxibenzeno como padrão interno. Após etapas de extração para remoção do DMSO, foi adicionado à mistura bruta o padrão (10 mol% com relação à 0,5 mmol do produto **5g**) (Figura 182). Assim, o rendimento foi determinado pela relação mol/mol a partir das integrais relativas, por comparação entre os sinais do composto **5g** e do 1,3,5-trimetoxibenzeno (x10).



1-(4-Metoxifenil)-2,5-dimetil-3,4-bis(fenilselanil)-1H-pirrol **5h:** Rend.: 0,218 g (85%); Óleo amarelado; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,08-7,05 (m, 4H); 7,05-7,01 (m, 2H); 6,98-6,89 (m, 6H); 6,88-6,84 (m, 2H); 3,70 (s, 3H); 2,06 (s, 6H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 159,3; 135,6; 134,4; 131,3; 128,8; 128,6; 128,58; 125,1; 114,4; 108,8; 55,4; 13,2. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 128,8 (2x CH); 128,6 (4x CH); 128,58 (4x CH); 125,1 (2x CH); 114,4 (2x CH); 55,4 (CH_3); 13,2 (2x CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 234,8. EM (int. rel., %) m/z : 513 (63,7); 356 (100,0); 276 (28,5); 200 (11,1); 107 (12,1); 77 (40,8). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{25}\text{H}_{23}\text{NOSe}_2$ $[\text{M}]^+$: 513,0110; encontrada: 513,0125.

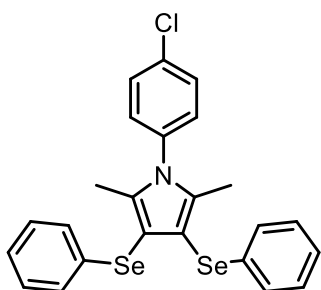


2,5-Dimetil-3,4-bis(fenilselanil)-1-(4-tolil)-1H-pirrol **5i:** Rend.: 0,224 g (90%); Óleo amarelado; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,22-7,18 (m, 2H); 7,10-6,94 (m, 12H); 2,35 (s, 3H); 2,09 (s, 6H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 138,5; 136,2; 135,5; 134,5; 130,0; 128,7; 128,66; 127,6; 125,2; 109,0; 21,2; 13,3. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 130,0 (2x CH); 128,7 (4x CH); 128,66 (4x CH); 127,6 (2x CH); 125,2 (2x CH); 21,2 (CH_3); 13,3 (2x CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 234,5. EM (int. rel., %) m/z : 497 (64,1); 340 (100,0); 260 (39,2); 184 (12,5); 91 (57,4); 77 (12,4). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{25}\text{H}_{23}\text{NSe}_2$ $[\text{M}]^+$: 497,0161; encontrada: 497,0176.



2,5-Dimetil-3,4-bis(fenilselanil)-1-(2-tolil)-1H-pirrol **5j:** Rend.: 0,236 g (95%); Óleo amarelado; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,28-7,18 (m, 3H); 7,10-7,05 (m, 5H); 7,00-6,91 (m, 6H); 1,97 (s, 6H); 1,90 (s, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 137,8; 136,1; 134,9; 134,6; 131,0; 129,0; 128,6; 128,3; 128,2; 127,0; 125,1; 108,9; 17,0; 12,7. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 131,0 (CH); 129,0 (CH); 128,6 (4x CH); 128,3 (4x CH); 128,2 (CH); 127,0 (CH); 125,1 (2x CH); 17,0 (CH_3); 12,7 (2x

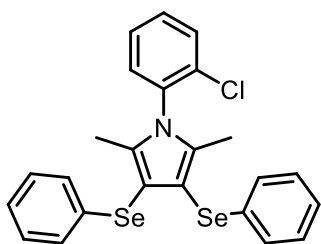
CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 233,1. EM (int. rel., %) *m/z*: 497 (69,4); 340 (100,0); 260 (35,7); 184 (13,9); 91 (57,7); 77 (16,4). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₂₅H₂₃NSe₂ [M]⁺: 497,0161; encontrada: 497,0171.



1-(4-Clorofenil)-2,5-dimetil-3,4-bis(fenilselanil)-1H-pirrol

5k: Rend.: 0,207 g (80%); Óleo amarelado; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 7,42-7,38 (m, 2H); 7,14-7,08 (m, 6H); 7,03-6,95 (m, 6H); 2,09 (s, 6H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 137,2; 135,2; 134,5; 134,2; 129,7; 129,2; 128,8; 128,7; 125,3; 109,8;

13,3. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 129,7 (2x CH); 129,2 (2x CH); 128,8 (4x CH); 128,7 (4x CH); 125,3 (2x CH); 13,3 (2x CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 236,0. EM (int. rel., %) *m/z*: 517 (70,8); 360 (100,0); 280 (29,2); 204 (13,2); 111 (49,5); 77 (16,7). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₂₄H₂₀ClNSe₂ [M]⁺: 516,9615; encontrada: 516,9626.

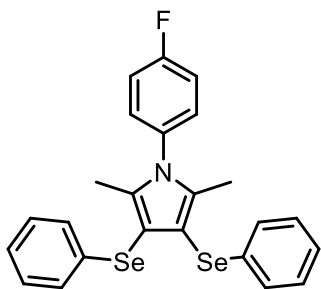


1-(2-Clorofenil)-2,5-dimetil-3,4-bis(fenilselanil)-1H-pirrol

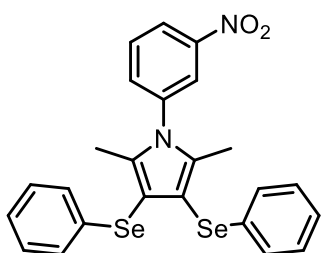
5l: Rend.: 0,129 g (50%); Óleo amarelado; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 7,54-7,49 (m, 1H); 7,40-7,28 (m, 3H); 7,10-7,05 (m, 4H); 7,03-6,95 (m, 6H); 2,04 (s, 6H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 136,6;

135,5; 134,4; 133,5; 130,5; 130,4; 130,1; 128,7; 128,4; 127,9; 125,1; 109,3; 12,8. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 130,5 (CH); 130,4 (CH); 130,1 (CH); 128,7 (4x CH); 128,4 (4x CH); 127,9 (CH); 125,1 (2x CH); 12,8 (2x CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 233,8. EM (int. rel., %) *m/z*: 517 (73,3); 360 (100,0); 280 (32,7); 204 (13,9); 111 (40,0); 77 (23,4). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₂₄H₂₀ClNSe₂ [M]⁺: 516,9615; encontrada: 516,9617.

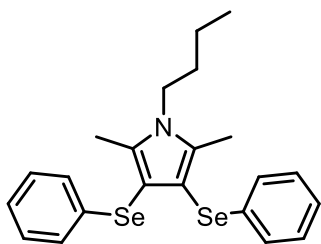
5. Parte Experimental



1-(4-Fluorofenil)-2,5-dimetil-3,4-bis(fenilselanil)-1H-pirrol 5m: Rend.: 0,215 g (86%); Óleo amarelado; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,10-7,02 (m, 8H); 6,98-6,90 (m, 6H); 2,05 (s, 6H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 162,1 (d, J = 247,3 Hz); 135,3; 134,6 (d, J = 3,2 Hz); 134,2; 129,6 (d, J = 8,6 Hz); 128,7; 128,6; 125,2; 116,3 (d, J = 22,5 Hz); 109,5; 13,2. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 129,6 (d, J = 8,6 Hz) (2x CH); 128,7 (4x CH); 128,6 (4x CH); 125,2 (2x CH); 116,3 (d, J = 22,5 Hz) (2x CH); 13,2 (2x CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 235,8. EM (int. rel., %) m/z : 501 (70,3); 344 (100,0); 264 (45,6); 188 (16,8); 95 (69,7); 77 (14,3). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{24}\text{H}_{20}\text{FNSe}_2$ $[\text{M}]^+$: 500,9910; encontrada: 500,9924.

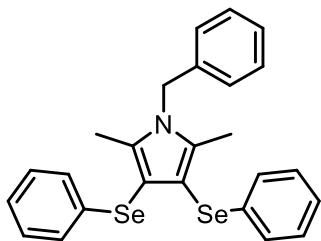


2,5-Dimetil-1-(3-nitrofenil)-3,4-bis(fenilselanil)-1H-pirrol 5n: Rend.: 0,145 g (55%); Sólido amarelo; P.F. = 93-95 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,21 (ddd, J = 8,1; 2,1 e 1,1 Hz, 1H); 8,07 (t, J = 2,1 Hz, 1H); 7,60 (t, J = 8,1 Hz, 1H); 7,51 (ddd, J = 8,1; 2,1 e 1,1 Hz, 1H); 7,10-7,07 (m, 4H); 7,02-6,94 (m, 6H); 2,11 (s, 6H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 148,6; 139,7; 135,0; 134,0; 133,8; 130,4; 128,9; 128,7; 125,5; 123,4; 123,0; 110,8; 13,3. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 135,0 (CH); 130,4 (CH); 128,9 (4x CH); 128,7 (4x CH); 125,5 (2x CH); 123,4 (CH); 123,0 (CH); 13,3 (2x CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 238,1. EM (int. rel., %) m/z : 528 (70,4); 371 (100,0); 291 (18,8); 215 (10,0); 122 (0,9); 77 (32,4). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{24}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_2\text{Se}_2$ $[\text{M}]^+$: 527,9855; encontrada: 527,9861.



1-Butil-2,5-dimetil-3,4-bis(fenilselanil)-1H-pirrol 5o: Rend.: 0,157 g (68%); Óleo amarelado; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,09-6,98 (m, 10H); 3,87 (t, J = 7,4 Hz, 2H); 2,37 (s, 6H); 1,65 (quint, J = 7,4 Hz, 2H); 1,38 (sext, J = 7,4 Hz, 2H); 0,97 (t, J = 7,4 Hz, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 134,8; 134,1; 128,5; 128,3; 125,0; 108,5;

45,6; 32,7; 20,0; 13,8; 12,5. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 128,5 (4x CH); 128,3 (4x CH); 125,0 (2x CH); 45,6 (CH₂); 32,7 (CH₂); 20,0 (CH₂); 13,8 (CH₃); 12,5 (2x CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 231,8. EM (int. rel., %) m/z : 463 (70,4); 306 (100,0); 226 (19,2); 150 (8,7); 108 (10,2); 77 (22,7). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₂₂H₂₅NSe₂ [M]⁺: 463,0317; encontrada: 463,0333.

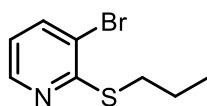


1-Benzil-2,5-dimetil-3,4-bis(fenilselanil)-1H-pirrol 5p:

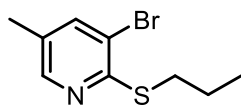
Rend.: 0,186 g (75%); Sólido branco; P.F. = 114-115 °C; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 7,35-7,25 (m, 3H); 7,13-7,01 (m, 10H); 6,91 (d, J = 7,3 Hz, 2H); 5,18 (s, 2H); 2,31 (s, 6H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 137,1; 135,0; 134,7; 128,9; 128,6; 128,4; 127,5; 125,5; 125,1; 109,3; 48,9; 12,5. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 128,9 (2x CH); 128,6 (4x CH); 128,4 (4x CH); 127,5 (CH); 125,5 (2x CH); 125,1 (2x CH); 48,9 (CH₂); 12,5 (2x CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 233,4. EM (rel. int., %) m/z : 497 (9,5); 340 (10,1); 260 (1,4); 91 (100,0); 77 (4,9). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₂₅H₂₄NSe₂ [M+H]⁺: 498,0239; encontrada: 498,0238.

5.2.6. Procedimento geral para a síntese das 3-bromo-2-(alquiltio)piridinas 102a-f

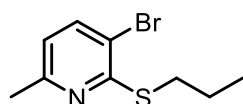
Em um balão reacional de duas bocas (25 mL), adicionou-se H₂O (6 mL), NaOH (8,4 mmol, 0,336 g) e o respectivo tiol (8,4 mmol, 0,640 g). A mistura reacional foi agitada à temperatura ambiente durante 30 minutos. Depois disso, adicionou-se a respectiva 3-bromo-2-cloropiridina **101** (6 mmol) e o brometo de tetrabutylamônio (0,18 mmol, 0,060 g). A mistura reacional permaneceu sob agitação a 82 °C (banho de óleo) por 12 h. Em seguida, adicionou-se água (25 mL) e a reação foi extraída com acetato de etila (3x 15 mL). A fase orgânica foi separada e seca sobre MgSO₄ e o solvente foi evaporado sob pressão reduzida. O produto foi isolado por cromatografia em coluna usando hexano/acetato de etila (97:3) como eluentes. Rendimento: 68-93%.



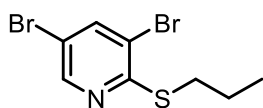
3-Bromo-2-(propiltio)piridina 102a: Rend.: 1,289 g (93%); Óleo incolor; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,37 (dd, J = 4,7 e 1,4 Hz, 1H); 7,68 (dd, J = 7,8 e 1,4 Hz, 1H); 6,85 (dd, J = 7,8 e 4,7 Hz, 1H); 3,16 (t, J = 7,4 Hz, 2H); 1,75 (sext, J = 7,4 Hz, 2H); 1,06 (t, J = 7,4 Hz, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 159,2; 147,4; 139,0; 119,6; 119,1; 32,9; 22,4; 13,6. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 147,4 (CH); 139,0 (CH); 119,6 (CH); 32,9 (CH_2); 22,4 (CH_2); 13,6 (CH_3). EM (rel. int., %) m/z : 233 (58,1); 231 (56,9); 202 (72,0); 189 (77,2); 110 (100,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_8\text{H}_{11}\text{BrNS}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 231,9796, encontrada: 231,9802.



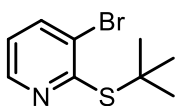
3-Bromo-5-metil-2-(propiltio)piridina 102b: Rend.: 1,000 g (68%); Óleo incolor; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,20 (dd, J = 1,8 e 0,7 Hz, 1H); 7,53 (dd, J = 1,8 e 0,7 Hz, 1H); 3,13 (t, J = 7,4 Hz, 2H); 2,24 (s, 3H); 1,74 (sext, J = 7,4 Hz, 2H); 1,05 (t, J = 7,4 Hz, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 155,5; 147,8; 139,8; 129,6; 118,6; 32,8; 22,4; 17,3; 13,6. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 147,8 (CH); 139,8 (CH); 32,8 (CH_2); 22,4 (CH_2); 17,3 (CH_3); 13,6 (CH_3). EM (rel. int., %) m/z : 247 (33,3); 245 (32,9); 216 (53,3); 202 (3,7); 124 (100,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_9\text{H}_{13}\text{BrNS}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 245,9952, encontrada: 245,9950.



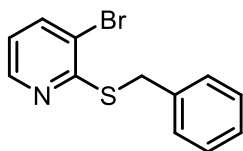
3-Bromo-6-metil-2-(propiltio)piridina 102c: Rend.: 1,058 g (72%); Óleo incolor; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,53 (d, J = 7,9 Hz, 1H); 6,69 (d, J = 7,9 Hz, 1H); 3,15 (t, J = 7,4 Hz, 2H); 2,45 (s, 3H); 1,74 (sext, J = 7,4 Hz, 2H); 1,05 (t, J = 7,4 Hz, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 157,6; 156,6; 139,1; 119,3; 115,7; 32,7; 23,9; 22,5; 13,6. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 139,1 (CH); 119,3 (CH); 32,7 (CH_2); 23,9 (CH_3); 22,5 (CH_2); 13,6 (CH_3). EM (rel. int., %) m/z : 247 (37,7); 245 (37,5); 216 (66,3); 203 (67,3); 124 (100,0); 77 (2,9). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_9\text{H}_{13}\text{BrNS}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 245,9952, encontrada: 245,9956.



3,5-Dibromo-2-(propiltio)piridina 102d: Rend.: 1,409 g (76%); Óleo incolor; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,42 (d, J = 2,1 Hz, 1H); 7,84 (d, J = 2,1 Hz, 1H); 3,12 (t, J = 7,4 Hz, 2H); 1,73 (sext, J = 7,4 Hz, 2H); 1,05 (t, J = 7,4 Hz, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 158,2; 148,2; 140,9; 119,0; 114,6; 33,1; 22,3; 13,6. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 148,2 (CH); 140,9 (CH); 33,1 (CH_2); 22,3 (CH_2); 13,6 (CH_3). EM (rel. int., %) m/z : 311 (38,0); 309 (19,8); 280 (62,9); 109 (38,8); 41 (100,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{Br}_2\text{NS}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 309,8901, encontrada: 309,8906.



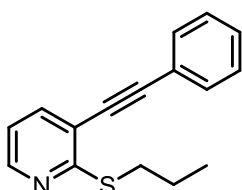
3-Bromo-2-(terc-butiltio)piridina 102e: Rend.: 1,088 g (74%); Óleo incolor; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,38 (dd, J = 4,7 e 1,6 Hz, 1H); 7,69 (dd, J = 7,9 e 1,6 Hz, 1H); 6,85 (dd, J = 7,9 e 4,7 Hz, 1H); 1,63 (s, 9H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 160,0; 147,0; 139,3; 119,7; 119,5; 48,7; 30,1. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 147,0 (CH); 139,3 (CH); 119,7 (CH); 30,1 (3x CH_3). EM (rel. int., %) m/z : 247 (11,0); 245 (10,7); 189 (100,0); 156 (3,3); 110 (71,3). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_9\text{H}_{13}\text{BrNS}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 245,9952, encontrada: 245,9966.



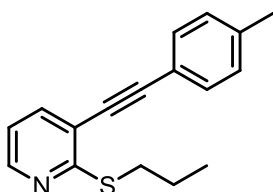
2-(Benziltio)-3-bromopiridina 102f: Rend.: 1,272 g (76%); Óleo incolor; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,39 (dd, J = 4,7 e 1,4 Hz, 1H); 7,68 (dd, J = 7,8 e 1,5 Hz, 1H); 7,43-7,41 (m, 2H); 7,31-7,27 (m, 2H); 7,25-7,21 (m, 1H); 6,87 (dd, J = 7,8 e 4,7 Hz, 1H); 4,43 (s, 2H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 158,6; 147,4; 139,1; 137,4; 129,2; 128,4; 127,1; 120,1; 118,6; 35,4. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 147,4 (CH); 139,1 (CH); 129,2 (2x CH); 128,4 (2x CH); 127,1 (CH); 120,1 (CH); 35,4 (CH_2). EM (rel. int., %) m/z : 279 (23,0); 200 (10,7); 121 (4,8); 109 (6,1); 91 (100,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{12}\text{H}_{11}\text{BrNS}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 279,9796, encontrada: 279,9786.

5.2.7. Procedimento geral para a síntese das 3-(ariletinil)-2-(alquiltio)piridinas 6a-h

Em um balão reacional de duas bocas de 50 mL, equipado com agitação magnética e sistema de refluxo sob atmosfera de nitrogênio, adicionou-se $\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$ (5 mol%, 0,105 g) e trietilamina (8 mL). Depois disso, a respectiva 3-bromo-2-(alquiltio)piridina **102** (3 mmol) foi solubilizada em trietilamina e adicionada, seguida pela adição de arilacetileno (3,3 mmol). A mistura foi agitada por 5 min à temperatura ambiente. Em seguida, CuI (2 mol%, 0,011 g) foi adicionado e a temperatura foi aumentada para 100 °C (banho de óleo). A reação permaneceu sob agitação magnética por 3 h. Em seguida, a reação foi arrefecida e extraída com acetato de etila (30 mL) e a fase orgânica foi lavada com solução aquosa de HCl 1% até a neutralização completa da fase aquosa. A fase orgânica foi separada, seca com MgSO_4 , filtrada e o solvente evaporado sob pressão reduzida. O produto foi purificado por coluna cromatográfica de sílica gel usando hexano/acetato de etila (99:1) como eluentes. Rendimento: 70-92%.

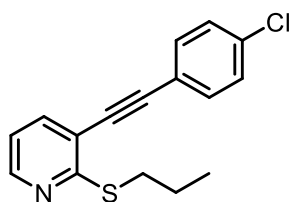


3-(Feniletinil)-2-(propiltio)piridina 6a: Rend.: 0,683 g (90%); Óleo marrom; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,35 (dd, J = 4,9 e 1,7 Hz, 1H); 7,63-7,56 (m, 3H); 7,37-7,34 (m, 3H); 6,93 (dd, J = 7,6 e 4,9 Hz, 1H); 3,20 (t, J = 7,4 Hz, 2H); 1,77 (sext, J = 7,4 Hz, 2H); 1,07 (t, J = 7,4 Hz, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 161,6; 147,9; 138,4; 131,6; 128,7; 128,3; 122,7; 118,1; 117,7; 98,0; 84,8; 31,8; 22,6; 13,7. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 147,9 (CH); 138,4 (CH); 131,6 (2x CH); 128,7 (CH); 128,3 (2x CH); 118,1 (CH); 31,8 (CH_2); 22,6 (CH_2); 13,7 (CH_3). EM (rel. int., %) m/z : 253 (43,5); 224 (100,0); 210 (64,1); 178 (13,5); 139 (17,9); 77 (12,9). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{16}\text{H}_{16}\text{NS}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 254,1003, encontrada: 254,1009.

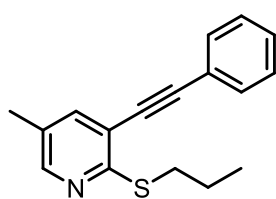


2-(Propiltio)-3-(4-toliletinil)piridina 6b: Rend.: 0,737 g (92%); Óleo laranja; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,34 (dd, J = 4,9 e 1,7 Hz, 1H); 7,61 (dd, J = 7,6 e 1,7 Hz, 1H); 7,48-7,46 (m, 2H); 7,17-7,15 (m, 2H); 6,93 (dd, J = 7,6 e 4,9 Hz, 1H); 3,19 (t, J = 7,4 Hz, 2H); 2,37 (s, 3H); 1,77 (sext, J = 7,4 Hz, 2H);

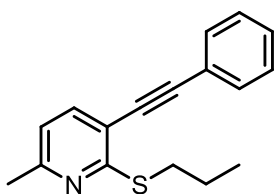
1,07 (t, $J = 7,4$ Hz, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 161,5; 147,7; 138,9; 138,3; 131,5; 129,1; 119,6; 118,2; 117,9; 98,3; 84,2; 31,8; 22,6; 21,5; 13,7. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 147,7 (CH); 138,3 (CH); 131,5 (2x CH); 129,1 (2x CH); 118,2 (CH); 31,8 (CH_2); 22,6 (CH_2); 21,5 (CH_3); 13,7 (CH_3). EM (rel. int., %) m/z : 267 (60,0); 239 (100,0); 224 (77,5); 178 (6,5); 139 (14,9); 77 (5,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{17}\text{H}_{18}\text{NS}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 268,1160, encontrada: 268,1160.



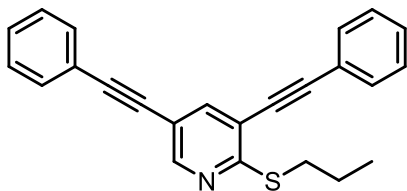
3-[(4-Clorofenil)etnil]-2-(propiltio)piridina **6c**: Rend.: 0,732 g (85%); Óleo marrom; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,36 (dd, $J = 4,9$ e 1,8 Hz, 1H); 7,60 (dd, $J = 7,6$ e 1,8 Hz, 1H); 7,51-7,48 (m, 2H); 7,34-7,31 (m, 2H); 6,93 (dd, $J = 7,6$ e 4,9 Hz, 1H); 3,20 (t, $J = 7,4$ Hz, 2H); 1,77 (sext, $J = 7,4$ Hz, 2H); 1,06 (t, $J = 7,4$ Hz, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 161,6; 148,1; 138,5; 134,7; 132,7; 128,7; 121,2; 118,1; 117,3; 96,8; 85,7; 31,8; 22,6; 13,6. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 148,1 (CH); 138,5 (CH); 132,7 (2x CH); 128,7 (2x CH); 118,1 (CH); 31,8 (CH_2); 22,6 (CH_2); 13,6 (CH_3). EM (rel. int., %) m/z : 287 (36,6); 259 (100,0); 224 (14,1); 178 (11,8); 139 (10,5); 77 (2,2). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{16}\text{H}_{15}\text{ClNS}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 288,0614, encontrada: 288,0612.



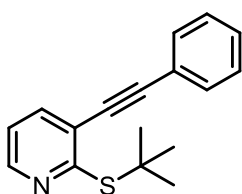
5-Metil-3-(feniletinil)-2-(propiltio)piridina **6d**: Rend.: 0,601 g (75%); Óleo marrom; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,20 (d, $J = 2,0$ Hz, 1H); 7,60-7,56 (m, 2H); 7,48 (d, $J = 2,0$ Hz, 1H); 7,37-7,34 (m, 3H); 3,18 (t, $J = 7,4$ Hz, 2H); 2,26 (s, 3H); 1,76 (sext, $J = 7,4$ Hz, 2H); 1,06 (t, $J = 7,4$ Hz, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 158,2; 148,5; 139,3; 131,6; 128,6; 128,3; 127,6; 122,8; 117,2; 97,6; 84,9; 31,8; 22,7; 17,5; 13,7. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 148,5 (CH); 139,3 (CH); 131,6 (2x CH); 128,6 (CH); 128,3 (2x CH); 31,8 (CH_2); 22,7 (CH_2); 17,5 (CH_3); 13,7 (CH_3). EM (rel. int., %) m/z : 267 (39,5); 238 (100,0); 224 (54,2); 178 (4,9); 139 (10,9); 77 (10,4). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{17}\text{H}_{18}\text{NS}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 268,1160, encontrada: 268,1157.



6-Metil-3-(feniletinil)-2-(propiltio)piridina 6e: Rend.: 0,561 g (70%); Óleo laranja; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 7,58-7,54 (m, 2H); 7,49 (d, $J = 7,8$ Hz, 1H); 7,36-7,31 (m, 3H); 6,77 (d, $J = 7,8$ Hz, 1H); 3,20 (t, $J = 7,3$ Hz, 2H); 2,49 (s, 3H); 1,76 (sext, $J = 7,3$ Hz, 2H); 1,06 (t, $J = 7,3$ Hz, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 160,4; 157,2; 138,7; 131,5; 128,4; 128,3; 123,0; 117,6; 114,5; 97,1; 85,1; 31,6; 24,5; 22,8; 13,6. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 138,7 (CH); 131,5 (2x CH); 128,4 (CH); 128,3 (2x CH); 117,6 (CH); 31,6 (CH_2); 24,5 (CH_3); 22,8 (CH_2); 13,6 (CH_3). EM (rel. int., %) m/z : 267 (43,2); 239 (100,0); 224 (44,9); 178 (5,5); 139 (14,0); 77 (7,3). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{17}\text{H}_{18}\text{NS}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 268,1160, encontrada: 268,1165.

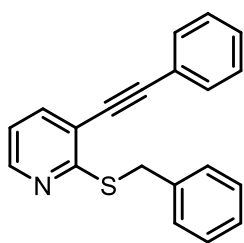


3,5-bis(Feniletinil)-2-(propiltio)piridina 6f: Rend.: 0,847 g (80%); Sólido marrom; P.F. = 61-62 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,49 (d, $J = 2,1$ Hz, 1H); 7,76 (d, $J = 2,1$ Hz, 1H); 7,61-7,58 (m, 2H); 7,55-7,51 (m, 2H); 7,39-7,35 (m, 6H); 3,22 (t, $J = 7,4$ Hz, 2H); 1,78 (sext, $J = 7,4$ Hz, 2H); 1,08 (t, $J = 7,4$ Hz, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 161,2; 150,1; 140,4; 131,7; 131,6; 128,9; 128,6; 128,41; 128,4; 122,7; 122,5; 117,3; 114,9; 98,5; 92,2; 85,6; 84,1; 32,0; 22,6; 13,6. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 150,1 (CH); 140,4 (CH); 131,7 (2x CH); 131,6 (2x CH); 128,9 (CH); 128,6 (CH); 128,41 (2x CH); 128,4 (2x CH); 32,0 (CH_2); 22,6 (CH_2); 13,6 (CH_3). EM (rel. int., %) m/z : 353 (70,0); 325 (100,0); 311 (68,5); 278 (10,2); 139 (11,2); 77 (20,6). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{24}\text{H}_{20}\text{NS}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 354,1316, encontrada: 354,1316.



2-(terc-Butiltio)-3-(feniletinil)piridina 6g: Rend.: 0,561 g (70%); Óleo marrom; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,38 (dd, $J = 4,8$ e 1,8 Hz, 1H); 7,64 (dd, $J = 7,7$ e 1,8 Hz, 1H); 7,59-7,55 (m, 2H); 7,37-7,34 (m, 3H); 6,96 (dd, $J = 7,7$ e 4,8 Hz, 1H); 1,65 (s, 9H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 162,2; 147,4; 138,9; 131,6; 128,7; 128,3; 122,9; 118,9; 118,4; 97,8; 85,2; 48,1; 30,5. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) = 147,4 (CH); 138,9 (CH); 131,6 (2x CH);

128,7 (CH); 128,3 (2x CH); 118,4 (CH); 30,5 (3x CH₃). EM (rel. int., %) *m/z*: 267 (11,4); 211 (100,0); 179 (4,0); 139 (9,9); 77 (3,1). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₇H₁₈NS [M+H]⁺: 268,1160, encontrada: 268,1166.



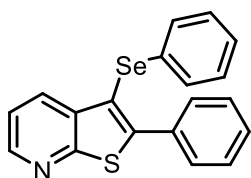
2-(Benziltio)-3-(feniletinil)piridina 6h: Rend.: 0,688 g (74%);

Óleo marrom; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 8,30 (dd, *J* = 4,9 e 1,7 Hz, 1H); 7,55 (dd, *J* = 7,6 e 1,7 Hz, 1H); 7,47-7,45 (m, 2H); 7,38-7,35 (m, 2H); 7,26-7,19 (m, 4H); 7,19-7,14 (m, 2H); 6,88 (dd, *J* = 7,6 e 4,9 Hz, 1H); 4,41 (s, 2H). RMN

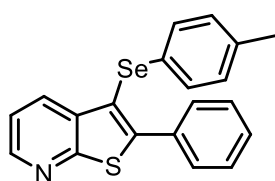
¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 161,0; 147,8; 138,6; 137,9; 131,6; 129,2; 128,8; 128,4; 128,3; 127,0; 122,5; 118,6; 117,4; 98,4; 84,5; 34,2. RMN DEPT-135 (100 MHz, CDCl₃) δ (ppm) = 147,8 (CH); 138,6 (CH); 131,6 (2x CH); 129,2 (2x CH); 128,8 (CH); 128,4 (2x CH); 128,3 (2x CH); 127,0 (CH); 118,6 (CH); 34,2 (CH₂). EM (rel. int., %) *m/z*: 301 (42,3); 224 (100,0); 210 (32,5); 178 (14,9); 139 (22,5); 77 (9,5). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₂₀H₁₆NS [M+H]⁺: 302,1003, encontrada: 302,0996.

5.2.8. Procedimento geral para a síntese das 2-aril-3-(organosselanil)tieno[2,3-*b*]piridinas 7a-v

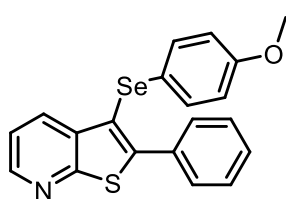
Em um balão reacional de duas bocas (25 mL), equipado com agitação magnética e sistema de refluxo, adicionou-se a respectiva 3-(ariletinil)-2-(alquiltio)piridina **6** (0,250 mmol), dicalcogeneto de diorganoíla **3** (0,125 mmol), Oxone[®] (0,250 mmol, 0,078 g) e etanol (3 mL). A mistura resultante foi aquecida a 78 °C e permaneceu sob agitação magnética durante o tempo indicado na Tabela 6. O progresso da reação foi monitorado por CCD para avaliar o consumo dos materiais de partida. Depois disso, adicionou-se água (25 mL) e a reação foi extraída com acetato de etila (3x 10 mL). A fase orgânica foi separada, seca com MgSO₄ e o solvente foi evaporado sob pressão reduzida. O produto foi isolado por coluna cromatográfica utilizando hexano/acetato de etila (98:2) como eluentes.



2-Fenil-3-(fenilselanil)tieno[2,3-*b*]piridina **7a:** Rend.: 0,091 g (99%); Sólido amarelo; P.F. = 110-112 °C; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 8,55 (dd, *J* = 4,6 e 1,4 Hz, 1H); 8,04 (dd, *J* = 8,1 e 1,4 Hz, 1H); 7,67-7,65 (m, 2H); 7,45-7,41 (m, 3H); 7,27 (dd, *J* = 8,1 e 4,6 Hz, 1H); 7,14-7,11 (m, 5H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 160,9; 149,2; 147,1; 135,9; 133,6; 132,4; 132,1; 130,1; 129,3; 129,2; 129,1; 128,4; 126,3; 120,3; 113,4. RMN DEPT-135 (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 147,1 (CH); 132,4 (CH); 130,1 (2x CH); 129,3 (2x CH); 129,2 (CH); 129,1 (2x CH); 128,4 (2x CH); 126,2 (CH); 120,3 (CH). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 262,3. EM (rel. int., %) *m/z*: 367 (48,3); 287 (100,0); 209 (13,8); 139 (9,9); 77 (16,1). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₉H₁₄NSSe [M+H]⁺: 368,0012, encontrada: 368,0006. Cristais incolores foram obtidos em uma mistura de CH₂Cl₂/acetato de etila (1:1).

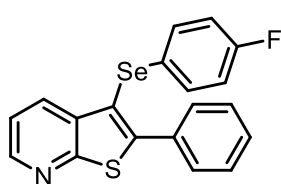


2-Fenil-3-(4-tolilselanil)tieno[2,3-*b*]piridina **7b:** Rend.: 0,081 g (85%); Sólido amarelo; P.F. = 106-107 °C; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 8,54 (dd, *J* = 4,6 e 1,6 Hz, 1H); 8,05 (dd, *J* = 8,1 e 1,6 Hz, 1H); 7,68-7,64 (m, 2H); 7,46-7,40 (m, 3H); 7,27 (dd, *J* = 8,1 e 4,6 Hz, 1H); 7,06-7,03 (m, 2H); 6,96-6,94 (m, 2H); 2,23 (s, 3H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 160,8; 148,7; 147,0; 136,2; 135,9; 133,6; 132,4; 130,1; 129,4; 129,1; 128,3; 128,1; 120,2; 113,8; 20,9. RMN DEPT-135 (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 147,0 (CH); 132,4 (CH); 130,07 (2x CH); 130,05 (2x CH); 129,4 (2x CH); 129,1 (CH); 128,3 (2x CH); 120,2 (CH); 20,9 (CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 256,6. EM (rel. int., %) *m/z*: 381 (43,3); 301 (100,0); 287 (11,7); 209 (9,5); 139 (8,8); 77 (5,9). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₂₀H₁₆NSSe [M+H]⁺: 382,0169, encontrada: 382,0160.



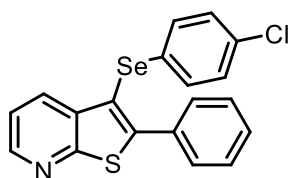
3-[(4-Metoxifenil)selanil]-2-feniltieno[2,3-*b*]piridina **7c:** Rend.: 0,094 g (95%); Óleo amarelado; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 8,54 (dd, *J* = 4,6 e 1,6 Hz, 1H); 8,08 (dd, *J* = 8,1 e 1,6 Hz, 1H); 7,68-7,64 (m, 2H); 7,47-7,42 (m, 3H); 7,28 (dd, *J* = 8,1 e 4,6 Hz, 1H); 7,13-7,10 (m, 2H); 6,71-6,67 (m, 2H); 3,70

(s, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 160,9; 158,8; 148,2; 147,0; 135,9; 133,7; 132,4; 131,9; 130,2; 129,1; 128,4; 121,6; 120,2; 115,0; 114,7; 55,2. RMN DEPT-135 (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 147,0 (CH); 132,4 (CH); 131,9 (2x CH); 130,2 (2x CH); 129,1 (CH); 128,4 (2x CH); 120,2 (CH); 115,0 (2x CH); 55,2 (CH₃). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 252,5. EM (rel. int., %) m/z : 397 (35,4); 317 (100,0); 289 (3,4); 209 (7,3); 139 (7,8); 77 (6,4). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{20}\text{H}_{16}\text{NOSSe}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 398,0118, encontrada: 398,0118.



3-[(4-Fluorofenil)selanil]-2-feniltieno[2,3-b]piridina 7d:

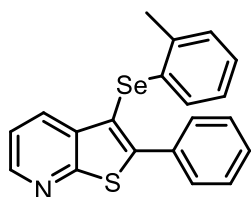
Rend.: 0,093 g (97%); Sólido laranja; P.F. = 116-118 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,56 (dd, J = 4,6 e 1,5 Hz, 1H); 8,04 (dd, J = 8,1 e 1,5 Hz, 1H); 7,65-7,62 (m, 2H); 7,45-7,42 (m, 3H); 7,29 (dd, J = 8,1 e 4,6 Hz, 1H); 7,12-7,09 (m, 2H); 6,86-6,81 (m, 2H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 161,8 (d, J = 244,8 Hz); 160,9; 149,0; 147,2; 135,7; 133,5; 132,2; 131,5 (d, J = 7,7 Hz); 130,1; 129,2; 128,4; 126,2 (d, J = 3,3 Hz); 120,3; 116,4 (d, J = 21,6 Hz); 113,8. RMN DEPT-135 (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 147,2 (CH); 132,2 (CH); 131,5 (d, J = 7,7 Hz) (2x CH); 130,1 (2x CH); 129,2 (CH); 128,4 (2x CH); 120,3 (CH); 116,4 (d, J = 21,6 Hz) (2x CH). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 259,1 (d, J = 2,6 Hz). EM (rel. int., %) m/z : 385 (43,6); 305 (100,0); 289 (6,7); 209 (11,5); 139 (12,2); 77 (5,2). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{19}\text{H}_{13}\text{FNSSe}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 385,9918, encontrada: 385,9921.



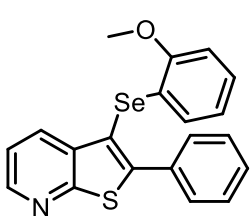
3-[(4-Chlorofenil)selanil]-2-feniltieno[2,3-b]piridina 7e:

Rend.: 0,081 g (81%); Sólido laranja; P.F. = 116-118 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,57 (dd, J = 4,6 e 1,5 Hz, 1H); 8,02 (dd, J = 8,1 e 1,5 Hz, 1H); 7,65-7,61 (m, 2H); 7,46-7,41 (m, 3H); 7,30 (dd, J = 8,1 e 4,6 Hz, 1H); 7,11-7,02 (m, 4H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 160,8; 149,5; 147,3; 135,6; 133,4; 132,4; 132,2; 130,4; 130,2; 130,0; 129,4; 129,3; 128,4; 120,4; 113,0. RMN DEPT-135 (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 147,3 (CH); 132,2 (CH); 130,4 (2x CH); 130,0 (2x CH); 129,4 (2x CH); 129,3 (CH); 128,4 (2x CH); 120,4 (CH). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 262,4. EM (rel. int., %) m/z : 401 (48,9); 321 (100,0);

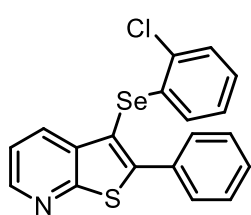
289 (10,4); 209 (15,3); 139 (15,4); 77 (8,4). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $C_{19}H_{13}ClNSSe$ $[M+H]^+$: 401,9622, encontrada: 401,9627.



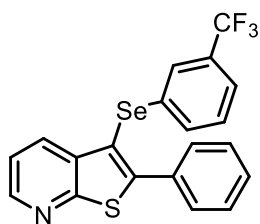
2-Fenil-3-(2-tolilselanil)tieno[2,3-b]piridina 7f: Rend.: 0,071g (75%); Sólido amarelo; P.F. = 112-114 °C; RMN 1H ($CDCl_3$, 400 MHz) δ (ppm) = 8,56 (dd, J = 4,6 e 1,6 Hz, 1H); 7,98 (dd, J = 8,1 e 1,6 Hz, 1H); 7,67-7,62 (m, 2H); 7,41-7,40 (m, 3H); 7,26 (dd, J = 8,1 e 4,6 Hz, 1H); 7,13-7,11 (m, 1H); 7,03 (td, J = 7,5 e 1,0 Hz, 1H); 6,88-6,85 (m, 1H); 6,74 (dd, J = 7,5 e 1,0 Hz, 1H); 2,37 (s, 3H). RMN $^{13}C\{^1H\}$ ($CDCl_3$, 100 MHz) δ (ppm) = 160,9; 149,5; 147,2; 136,7; 135,9; 133,6; 132,9; 132,4; 130,2; 130,0; 129,2; 128,41; 128,4; 126,8; 126,1; 120,4; 112,9; 21,4. RMN DEPT-135 ($CDCl_3$, 100 MHz) δ (ppm) = 147,2 (CH); 132,4 (CH); 130,2 (CH); 130,0 (2x CH); 129,2 (CH); 128,41 (CH); 128,4 (2x CH); 126,8 (CH); 126,1 (CH); 120,4 (CH); 21,4 (CH_3). RMN $^{77}Se\{^1H\}$ ($CDCl_3$, 76 MHz) δ (ppm) = 232,0. EM (rel. int., %) m/z : 381 (54,3); 301 (11,4); 289 (8,4); 211 (100,0); 139 (10,0); 77 (7,4). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $C_{20}H_{16}NSSe$ $[M+H]^+$: 382,0169, encontrada: 382,0167.



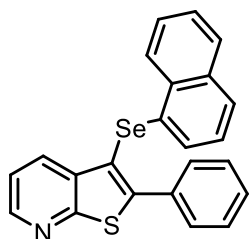
3-[(2-Metoxifenil)selanil]-2-feniltieno[2,3-b]piridina 7g: Rend.: 0,084 g (85%); Sólido amarelado; P.F. = 170-171 °C; RMN 1H ($CDCl_3$, 400 MHz) δ (ppm) = 8,56 (dd, J = 4,6 e 1,6 Hz, 1H); 8,04 (dd, J = 8,1 e 1,6 Hz, 1H); 7,68-7,64 (m, 2H); 7,43-7,37 (m, 3H); 7,27 (dd, J = 8,1 e 4,6 Hz, 1H); 7,13-7,08 (m, 1H); 6,82 (dd, J = 7,8 e 1,2 Hz, 1H); 6,66 (td, J = 7,8 e 1,2 Hz, 1H); 6,58-6,56 (m, 1H); 3,89 (s, 3H). RMN $^{13}C\{^1H\}$ ($CDCl_3$, 100 MHz) δ (ppm) = 160,9; 156,2; 150,1; 147,2; 136,1; 133,6; 132,6; 129,9; 129,1; 128,4; 128,1; 126,9; 121,8; 121,6; 120,4; 112,0; 110,2; 55,8. RMN DEPT-135 ($CDCl_3$, 100 MHz) δ (ppm) = 147,2 (CH); 132,6 (CH); 129,9 (2x CH); 129,1 (CH); 128,4 (2x CH); 128,1 (CH); 126,9 (CH); 121,8 (CH); 120,4 (CH); 110,2 (CH); 55,8 (CH_3). RMN $^{77}Se\{^1H\}$ ($CDCl_3$, 76 MHz) δ (ppm) = 219,2. EM (rel. int., %) m/z : 397 (100,0); 301 (20,3); 289 (15,9); 209 (24,1); 139 (20,5); 77 (48,3). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $C_{20}H_{16}NOSse$ $[M+H]^+$: 398,0118, encontrada: 398,0118.



3-[(2-Clorofenil)selanil]-2-feniltieno[2,3-*b*]piridina **7h:** Rend.: 0,073 g (73%); Sólido amarelo; P.F. = 134-136 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,59 (dd, J = 4,6 e 1,6 Hz, 1H); 8,02 (dd, J = 8,1 e 1,6 Hz, 1H); 7,66-7,62 (m, 2H); 7,44-7,40 (m, 3H); 7,33-7,29 (m, 2H); 7,06 (td, J = 7,7 e 1,4 Hz, 1H); 6,92 (td, J = 7,7 e 1,4 Hz, 1H); 6,61 (dd, J = 7,7 e 1,4 Hz, 1H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 160,9; 150,8; 147,4; 135,7; 133,3; 132,9; 132,5; 132,4; 129,9; 129,5; 129,4; 128,7; 128,5; 127,5; 127,0; 120,5; 112,3. RMN DEPT-135 (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 147,4 (CH); 132,4 (CH); 129,9 (2x CH); 129,5 (CH); 129,4 (CH); 128,7 (CH); 128,5 (2x CH); 127,5 (CH); 127,0 (CH); 120,5 (CH). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 259,8. EM (rel. int., %) m/z : 401 (76,8); 321 (15,9); 286 (100,0); 209 (24,9); 139 (20,6); 77 (11,9). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{19}\text{H}_{13}\text{ClNSSe}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 401,9622, encontrada: 401,9621.

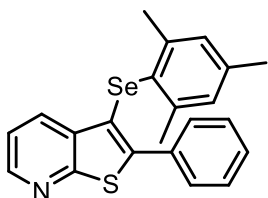


2-Fenil-3-[(3-(trifluorometil)fenil)selanil]tieno[2,3-*b*]piridina **7i:** Rend.: 0,078 g (72%); Sólido amarelo; P.F. = 72-74 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,59 (dd, J = 4,6 e 1,6 Hz, 1H); 8,05 (dd, J = 8,1 e 1,6 Hz, 1H); 7,65-7,60 (m, 2H); 7,47-7,42 (m, 4H); 7,37-7,35 (m, 1H); 7,32 (dd, J = 8,1 e 4,6 Hz, 1H); 7,23-7,16 (m, 2H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 160,8; 150,0; 147,4; 135,5; 133,30; 133,29; 132,2; 132,1; 131,5 (q, J = 32,3 Hz); 130,0; 129,6; 129,4; 128,5; 125,8 (q, J = 3,8 Hz); 123,5 (q, J = 271,0 Hz); 123,1 (q, J = 3,7 Hz); 120,5; 112,5. RMN DEPT-135 (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 147,4 (CH); 132,2 (CH); 132,1 (CH); 130,0 (2x CH); 129,6 (CH); 129,4 (CH); 128,5 (2x CH); 125,8 (q, J = 3,8 Hz) (CH); 123,1 (q, J = 3,7 Hz) (CH); 120,5 (CH). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 271,0. EM (rel. int., %) m/z : 435 (44,4); 355 (100,0); 289 (9,6); 209 (12,6); 139 (12,9); 77 (6,5). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{20}\text{H}_{13}\text{F}_3\text{NSSe}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 435,9886, encontrada: 435,9883.



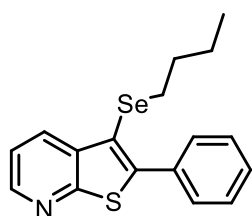
3-(Naftalen-1-ilselanil)-2-feniltieno[2,3-*b*]piridina **7j:** Rend.: 0,094 g (90%); Sólido amarelo; P.F. = 121-122 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,52 (dd, J = 4,6 e 1,6 Hz, 1H); 8,12-8,08 (m, 1H); 7,97 (dd, J = 8,1 e 1,6 Hz, 1H); 7,81-7,77

(m, 1H); 7,70-7,65 (m, 2H); 7,63-7,61 (m, 1H); 7,52-7,46 (m, 2H); 7,40-7,36 (m, 3H); 7,18 (dd, $J = 8,1$ e $4,6$ Hz, 1H); 7,14-7,10 (m, 1H); 7,06-7,04 (m, 1H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 160,8; 149,6; 147,1; 135,8; 133,9; 133,5; 132,4; 132,3; 130,9; 130,0; 129,2; 128,6; 128,4; 127,3; 126,9; 126,4; 126,3; 126,0; 125,6; 120,3; 112,9. RMN DEPT-135 (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 147,1 (CH); 132,4 (CH); 130,0 (2x CH); 129,2 (CH); 128,6 (CH); 128,4 (2x CH); 127,3 (CH); 126,9 (CH); 126,4 (CH); 126,3 (CH); 126,0 (CH); 125,6 (CH); 120,3 (CH). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 225,9. EM (rel. int., %) m/z : 417 (72,5); 336 (100,0); 289 (9,7); 209 (15,4); 139 (12,7); 77 (18,3). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{23}\text{H}_{16}\text{NSSe}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 418,0169, encontrada: 418,0172. Cristais incolores foram obtidos em uma mistura de CH_2Cl_2 /acetato de etila (1:1).



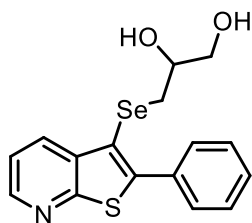
3-(Mesitilselanil)-2-feniltieno[2,3-b]piridina 7k: Rend.: 0,089 g (87%); Óleo amarelo; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,46 (dd, $J = 4,6$ e $1,6$ Hz, 1H); 7,66 (dd, $J = 8,1$ e $1,6$ Hz, 1H); 7,55-7,51 (m, 2H); 7,44-7,39 (m, 3H); 7,14 (dd, $J = 8,1$ e $4,6$ Hz, 1H); 6,75 (s, 2H); 2,19 (s, 6H); 2,18 (s, 3H). RMN

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 160,7; 146,6; 143,9; 141,4; 137,9; 135,4; 134,0; 131,3; 129,9; 128,9; 128,8; 128,2; 127,4; 119,8; 115,9; 23,9; 20,8. RMN DEPT-135 (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 146,6 (CH); 131,3 (CH); 129,9 (2x CH); 128,9 (2x CH); 128,8 (CH); 128,2 (2x CH); 119,8 (CH); 23,9 (2x CH_3); 20,8 (CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 206,4. EM (rel. int., %) m/z : 409 (61,5); 289 (6,1); 209 (8,6); 198 (100,0); 139 (8,1); 77 (26,1). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{22}\text{H}_{20}\text{NSSe}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 410,0482, encontrada: 410,0476.



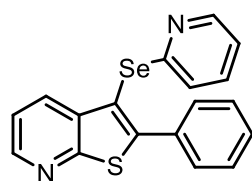
3-(Butilselanil)-2-feniltieno[2,3-b]piridina 7l: Rend.: 0,081 g (93%); Óleo laranja; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,56 (dd, $J = 4,6$ e $1,6$ Hz, 1H); 8,25 (dd, $J = 8,1$ e $1,6$ Hz, 1H); 7,74-7,71 (m, 2H); 7,49-7,42 (m, 3H); 7,37 (dd, $J = 8,1$ e $4,6$ Hz, 1H); 2,60 (t, $J = 7,4$ Hz, 2H); 1,38 (quint, $J = 7,4$ Hz, 2H); 1,19 (sext, $J = 7,4$ Hz, 2H); 0,72 (t, $J = 7,4$ Hz, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 160,8; 146,9; 146,8; 136,5; 134,0; 132,2; 130,2; 128,8; 128,3; 120,0; 114,5; 32,1; 28,7; 22,4; 13,3. RMN DEPT-135 (CDCl_3 , 100 MHz) δ

(ppm) = 146,8 (CH); 132,2 (CH); 130,2 (2x CH); 128,8 (CH); 128,3 (2x CH); 120,0 (CH); 32,1 (CH₂); 28,7 (CH₂); 22,4 (CH₂); 13,3 (CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 135,5. EM (rel. int., %) *m/z*: 347 (38,6); 289 (18,8); 211 (100,0); 139 (6,5); 77 (4,5). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₇H₁₈NSSe [M+H]⁺: 348,0325, encontrada: 348,0324.



3-[(2-Feniltieno[2,3-*b*]piridin-3-il)selanil]propano-1,2-diol 7m:

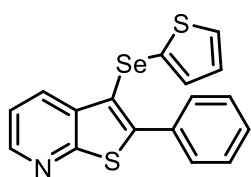
Purificado por coluna cromatográfica (hexano/acetato de etila = 60:40); Rend.: 0,078 g (85%); Sólido amarelo; P.F. = 68-70 °C; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 8,48 (dd, *J* = 4,7 e 1,6 Hz, 1H); 8,23 (dd, *J* = 8,1 e 1,6 Hz, 1H); 7,68-7,65 (m, 2H); 7,47-7,40 (m, 3H); 7,33 (dd, *J* = 8,1 e 4,7 Hz, 1H); 3,47-3,41 (m, 2H); 3,34-3,29 (m, 1H); 3,10 (brs, 1H); 2,84 (brs, 1H); 2,73-2,61 (m, 2H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 160,4; 147,7; 146,8; 136,1; 133,5; 132,2; 130,2; 129,2; 128,5; 120,3; 113,6; 70,5; 65,0; 32,2. RMN DEPT-135 (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 146,8 (CH); 132,2 (CH); 130,2 (2x CH); 129,2 (CH); 128,5 (2x CH); 120,3 (CH); 70,5 (CH); 65,0 (CH₂); 32,2 (CH₂). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 90,9. EM (rel. int., %) *m/z*: 365 (33,9); 290 (54,1); 211 (100,0); 139 (9,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₆H₁₆NO₂SSe [M+H]⁺: 366,0067, encontrada: 366,0068.



2-Fenil-3-(piridin-2-ilselanil)tieno[2,3-*b*]piridina 7n: Rend.:

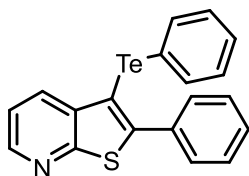
0,076 g (83%); Óleo amarelo; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 8,58 (dd, *J* = 4,6 e 1,6 Hz, 1H); 8,40-8,38 (m, 1H); 8,08 (dd, *J* = 8,1 e 1,6 Hz, 1H); 7,69-7,66 (m, 2H); 7,44-7,39 (m, 3H); 7,33-7,28 (m, 2H); 6,98 (ddd, *J* = 7,4; 4,8 e 1,0 Hz, 1H); 6,76-6,74 (m, 1H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 160,8; 157,6; 150,0; 149,9; 147,3; 136,8; 135,9; 133,4; 132,4; 130,0; 129,3; 128,4; 123,2; 120,5; 120,4; 112,7. RMN DEPT-135 (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 150,0 (CH); 147,3 (CH); 136,8 (CH); 132,4 (CH); 130,0 (2x CH); 129,3 (CH); 128,4 (2x CH); 123,2 (CH); 120,5 (CH); 120,4 (CH). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 311,8. EM (rel. int., %) *m/z*: 368 (9,5); 367 (43,1); 287 (100,0); 209 (12,5); 139 (10,2); 77 (13,0). EMAR

(APCI-QTOF) massa calculada para $C_{18}H_{13}N_2SSe$ $[M+H]^+$: 368,9965, encontrada: 368,9969.



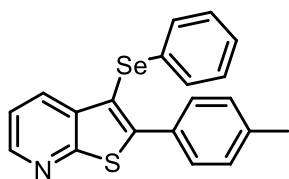
2-Fenil-3-(tiofen-2-ilselanil)tieno[2,3-b]piridina 7o: Rend.:

0,066 g (70%); Óleo laranja; RMN 1H ($CDCl_3$, 400 MHz) δ (ppm) = 8,56 (dd, J = 4,6 e 1,6 Hz, 1H); 8,28 (dd, J = 8,1 e 1,6 Hz, 1H); 7,71-7,68 (m, 2H); 7,52-7,45 (m, 3H); 7,36 (dd, J = 8,1 e 4,6 Hz, 1H); 7,24 (dd, J = 5,3 e 1,1 Hz, 1H); 7,02 (dd, J = 3,6 e 1,1 Hz, 1H); 6,85 (dd, J = 5,3 e 3,6 Hz, 1H). RMN $^{13}C\{^1H\}$ ($CDCl_3$, 100 MHz) δ (ppm) = 160,7; 148,4; 147,1; 135,7; 133,6; 133,5; 132,2; 130,4; 129,9; 129,2; 128,4; 127,7; 125,0; 120,3; 115,5. RMN DEPT-135 ($CDCl_3$, 100 MHz) δ (ppm) = 147,1 (CH); 133,5 (CH); 132,2 (CH); 130,4 (2x CH); 129,9 (CH); 129,2 (CH); 128,4 (2x CH); 127,7 (CH); 120,3 (CH). RMN $^{77}Se\{^1H\}$ ($CDCl_3$, 76 MHz) δ (ppm) = 187,9. EM (rel. int., %) m/z : 373 (29,9); 293 (100,0); 209 (13,1); 139 (17,9); 77 (9,7). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $C_{17}H_{12}NS_2Se$ $[M+H]^+$: 373,9576, encontrada: 373,9573.

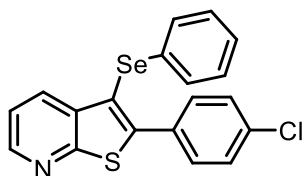


2-Fenil-3-(feniltelanil)tieno[2,3-b]piridina 7q: Rend.: 0,084 g

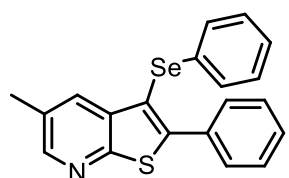
(81%); Óleo laranja; RMN 1H ($CDCl_3$, 400 MHz) δ (ppm) = 8,53 (dd, J = 4,6 e 1,6 Hz, 1H); 8,13 (dd, J = 8,1 e 1,6 Hz, 1H); 7,58-7,54 (m, 2H); 7,45-7,41 (m, 3H); 7,35-7,32 (m, 2H); 7,29 (dd, J = 8,1 e 4,6 Hz, 1H); 7,17-7,13 (m, 1H); 7,10-7,06 (m, 2H). RMN $^{13}C\{^1H\}$ ($CDCl_3$, 100 MHz) δ (ppm) = 162,2; 151,4; 147,1; 138,5; 135,3; 135,2; 134,8; 130,4; 129,5; 129,1; 128,3; 127,3; 120,5; 115,3; 101,6. RMN DEPT-135 ($CDCl_3$, 100 MHz) δ (ppm) = 147,1 (CH); 135,2 (2x CH); 134,8 (CH); 130,4 (2x CH); 129,5 (2x CH); 129,1 (CH); 128,3 (2x CH); 127,3 (CH); 120,5 (CH). RMN $^{125}Te\{^1H\}$ ($CDCl_3$, 126 MHz) δ (ppm) = 412,7. EM (rel. int., %) m/z : 417 (37,7); 287 (100,0); 209 (19,4); 139 (14,1); 77 (33,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $C_{19}H_{14}NSTe$ $[M+H]^+$: 417,9909, encontrada: 417,9922.



3-(Fenilselanil)-2-(4-tolil)tieno[2,3-b]piridina 7r: Rend.: 0,085 g (88%); Óleo amarelado; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,52 (dd, J = 4,6 e 1,6 Hz, 1H); 8,01 (dd, J = 8,1 e 1,6 Hz, 1H); 7,57-7,54 (m, 2H); 7,24-7,21 (m, 3H); 7,14-7,08 (m, 5H); 2,37 (s, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 160,7; 149,4; 146,9; 139,3; 135,9; 132,2; 132,16; 130,6; 129,9; 129,2; 129,1; 129,0; 126,1; 120,2; 112,8; 21,3. RMN DEPT-135 (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 146,9 (CH); 132,2 (CH); 129,9 (2x CH); 129,2 (2x CH); 129,1 (2x CH); 129,0 (2x CH); 126,1 (CH); 120,2 (CH); 21,3 (CH_3). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 261,6. EM (rel. int., %) m/z : 381 (43,8); 301 (100,0); 209 (12,0); 139 (4,9); 77 (9,8). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{20}\text{H}_{16}\text{N}\text{SSe}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 382,0169, encontrada: 382,0157.

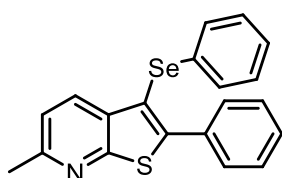


2-(4-Clorofenil)-3-(fenilselanil)tieno[2,3-b]piridina 7s: Rend.: 0,089 g (89%); Sólido laranja; P.F. = 84-85 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,58 (dd, J = 4,6 e 1,3 Hz, 1H); 8,07 (dd, J = 8,2 e 1,3 Hz, 1H); 7,59 (d, J = 8,4 Hz, 2H); 7,41 (d, J = 8,4 Hz, 2H); 7,31 (dd, J = 8,2 e 4,6 Hz, 1H); 7,15-7,11 (m, 5H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 160,7; 147,7; 147,4; 135,9; 135,4; 132,5; 132,0; 131,8; 131,3; 129,4; 129,2; 128,7; 126,4; 120,5; 114,0. RMN DEPT-135 (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 147,7 (CH); 132,8 (CH); 131,6 (2x CH); 129,7 (2x CH); 129,5 (2x CH); 129,0 (2x CH); 126,7 (CH); 120,8 (CH). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 261,0. EM (rel. int., %) m/z : 401 (48,6); 321 (100,0); 209 (21,8); 139 (2,2); 77 (14,4). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{19}\text{H}_{13}\text{Cl}\text{N}\text{SSe}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 401,9622, encontrada: 401,9614.



5-Metil-2-fenil-3-(fenilselanil)tieno[2,3-b]piridina 7t: Rend.: 0,067 g (70%); Sólido amarelado; P.F. = 143-145 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,41-8,40 (m, 1H); 7,87-7,86 (m, 1H); 7,67-7,62 (m, 2H); 7,44-7,39 (m, 3H); 7,15-7,11 (m, 5H); 2,40 (s, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 158,1; 149,6; 148,4; 135,8; 133,7; 132,4; 132,3; 130,1; 130,0; 129,3; 129,1; 128,9; 128,3; 126,1; 112,8; 18,5. RMN DEPT-135 (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 148,4

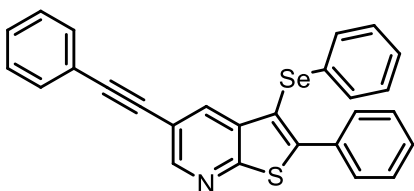
(CH); 132,3 (CH); 130,0 (2x CH); 129,3 (2x CH); 129,1 (CH); 128,9 (2x CH); 128,3 (2x CH); 126,1 (CH); 18,5 (CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 259,2. EM (rel. int., %) *m/z*: 381 (40,3); 301 (100,0); 209 (5,8); 139 (4,7); 77 (15,7). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₂₀H₁₆NSSe [M+H]⁺: 382,0169, encontrada: 382,0177.



6-Metil-2-fenil-3-(fenilselanil)tieno[2,3-b]piridina 7u: Rend.:

0,073 g (76%); Óleo laranja; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 7,90 (d, *J* = 8,2 Hz, 1H); 7,66-7,62 (m, 2H); 7,43-7,37 (m, 3H); 7,13-7,09 (m, 6H); 2,66 (s, 3H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 160,3; 156,5; 147,7; 133,7; 133,5; 132,5; 132,2;

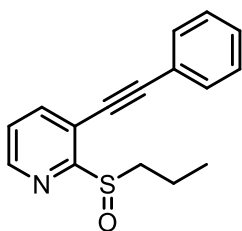
130,0; 129,2; 129,0; 128,9; 128,3; 126,1; 120,6; 113,1; 24,3. RMN DEPT-135 (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 132,5 (CH); 130,0 (2x CH); 129,2 (2x CH); 129,0 (2x CH); 128,9 (CH); 128,3 (2x CH); 126,1 (CH); 120,6 (CH); 24,3 (CH₃). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 263,0. EM (rel. int., %) *m/z*: 381 (45,7); 301 (100,0); 209 (6,0); 139 (7,6); 77 (12,9). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₂₀H₁₆NSSe [M+H]⁺: 382,0169, encontrada: 382,0175.



2-Fenil-5-(feniletinil)-3-(fenilselanil)tieno[2,3-

b]piridina 7v: Rend.: 0,092 g (79%); Sólido amarelado; P.F. = 150-152 °C; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 8,60 (d, *J* = 1,6 Hz, 1H); 8,12

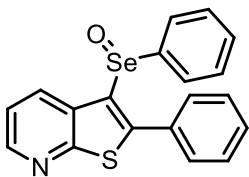
(d, *J* = 1,6 Hz, 1H); 7,56-7,54 (m, 2H); 7,45-7,43 (m, 2H); 7,32-7,31 (m, 3H); 7,25-7,23 (m, 3H); 7,05-7,03 (m, 5H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 159,6; 150,5; 149,5; 135,6; 134,5; 133,3; 132,0; 131,6; 130,0; 129,4; 129,3; 129,0; 128,7; 128,41; 128,4; 126,3; 122,5; 117,2; 113,1; 92,3; 86,3. RMN DEPT-135 (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 149,5 (CH); 134,5 (CH); 131,6 (2x CH); 130,0 (2x CH); 129,4 (2x CH); 129,3 (CH); 129,0 (2x CH); 128,7 (CH); 128,41 (2x CH); 128,4 (2x CH); 126,3 (CH). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 259,9. EM (rel. int., %) *m/z*: 467 (55,3); 387 (100,0); 309 (8,2); 139 (2,4); 77 (17,6). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₂₇H₁₈NSSe [M+H]⁺: 468,0325, encontrada: 468,0323.



3-(Feniletinil)-2-(propilsulfinil)piridina 103: Purificado por coluna cromatográfica (hexano/acetato de etila = 85:15); Rend.: 0,059 g (87%); Óleo amarelo; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,75 (dd, J = 4,7 e 1,6 Hz, 1H); 7,88 (dd, J = 7,8 e 1,6 Hz, 1H); 7,57-7,53 (m, 2H); 7,45-7,38 (m, 4H); 3,10-3,05 (m, 2H); 1,97-1,74 (m, 2H); 1,09 (t, J = 7,4 Hz, 3H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 162,9; 149,7; 140,2; 131,6; 129,6; 128,6; 124,7; 121,5; 118,4; 100,2; 82,0; 55,7; 16,2; 13,3. RMN DEPT-135 (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 149,7 (CH); 140,2 (CH); 131,6 (2x CH); 129,6 (CH); 128,6 (2x CH); 124,7 (CH); 55,7 (CH_2); 16,2 (CH_2); 13,3 (CH_3). EM (rel. int., %) m/z : 269 (3,0); 226 (100,0); 210 (6,5); 198 (62,4); 178 (9,2); 139 (8,9). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{16}\text{H}_{16}\text{NOS}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 270,0953, encontrada: 270,0950.

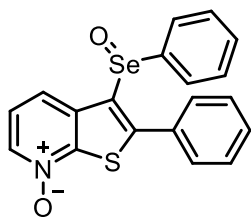
5.2.9. Procedimento geral para a síntese dos compostos de oxidação 105-107

Em um tubo reacional de vidro de 10 mL, foram adicionados o 2-fenil-3-(fenilselanyl)tieno [2,3-*b*]piridina **7a** (0,25 mmol, 0,0917 g) e 2 mL de clorofórmio. Em seguida, adicionou-se as respectivas quantidades de ácido *m*-cloroperoxibenzóico (0,3 mmol, 0,052 g para **105**; 0,75 mmol, 0,129 g para **106**; 1,5 mmol, 0,259 g para **107**) em porções ao longo de um período de 30 minutos. Em seguida, a reação permaneceu sob agitação magnética à temperatura ambiente pelo tempo indicado no Esquema 52. Por fim, a mistura reacional foi lavada com solução aquosa de NaOH a 10% e extraída com diclorometano. A fase orgânica foi separada, seca com MgSO_4 , filtrada e o solvente evaporado sob pressão reduzida. O produto foi purificado por coluna cromatográfica de gel de sílica usando metanol/acetato de etila como eluentes.



2-Fenil-3-(fenilseleninil)tieno[2,3-*b*]piridina 105: Purificado por coluna cromatográfica (metanol/acetato de etila = 10:90); Rend.: 0,087 g (91%); Óleo amarelado; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,53 (dd, J = 4,5 e 1,1 Hz, 1H); 8,48 (dd, J = 8,1 e 1,1 Hz, 1H); 7,69-7,65 (m, 4H); 7,56-7,55 (m, 3H); 7,50-7,45 (m, 3H); 7,20 (dd, J = 8,1 e 4,5 Hz, 1H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 160,7; 150,1;

147,3; 140,9; 131,7; 131,5; 131,47; 131,0; 130,3; 129,9; 129,7; 129,2; 126,7; 126,4; 120,1. RMN DEPT-135 (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 147,3 (CH); 131,5 (CH); 131,0 (CH); 130,3 (CH); 129,9 (2x CH); 129,7 (2x CH); 129,2 (2x CH); 126,4 (2x CH); 120,1 (CH). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 867,7. EM (rel. int., %) *m/z*: 383 (0,6); 367 (38,6); 287 (100,0); 209 (19,2); 139 (17,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₉H₁₄NOSse [M+H]⁺: 383,9961, encontrada: 383,9956.

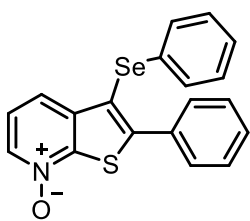


2-Fenil-3-(fenilseleninil)tieno[2,3-*b*]piridina 7-óxido **106:**

Purificado por coluna cromatográfica (metanol/acetato de etila = 30:70); Rend.: 0,084 g (84%); Sólido amarelado; P.F. = 204-206 °C; RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) δ (ppm) = 8,25 (dd, *J* = 6,3 e 0,5 Hz, 1H); 8,22 (dd, *J* = 8,2 e 0,5 Hz, 1H); 7,69-7,64 (m, 4H); 7,61-7,57 (m, 3H); 7,50-7,44 (m, 3H); 7,23 (dd, *J* = 8,2 e 6,3 Hz, 1H). RMN ¹³C{¹H} (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 150,8; 148,6; 140,7; 135,3; 134,6; 131,1; 130,7; 130,5; 129,63; 129,6; 129,3; 128,1; 126,1; 122,4; 121,9. RMN DEPT-135 (CDCl₃, 100 MHz) δ (ppm) = 134,6 (CH); 131,1 (CH); 130,7 (CH); 129,63 (2x CH); 129,6 (2x CH); 129,3 (2x CH); 126,1 (2x CH); 122,4 (CH); 121,7 (CH). RMN ⁷⁷Se{¹H} (CDCl₃, 76 MHz) δ (ppm) = 875,5. EM (rel. int., %) *m/z*: 399 (1,9); 367 (26,2); 287 (100,0); 210 (13,1); 139 (19,0). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para C₁₉H₁₄NO₂SSe [M+H]⁺: 399,9910, encontrada: 399,9901. Cristais incolores foram obtidos em uma mistura de acetona/metanol (1:1).

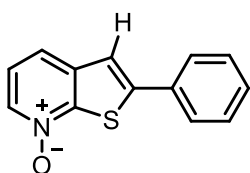
5.2.10. Procedimento geral para a síntese dos compostos **108 e **109****

Em um tubo reacional selado e seco, foram adicionados o 2-fenil-3-(fenilseleninil) tieno[2,3-*b*]piridina-7-óxido **106** (0,25 mmol, 0,100 g), KO^tBu (0,5 mmol, 0,056 g), disseleneto de difenila **3a** (0,75 mmol, 0,236 g) para **108**; ou H₂O (1,5 mmol, 0,027 g) para **109**; e tolueno (2 mL) sob atmosfera de nitrogênio à temperatura ambiente. Depois disso, a mistura de reação foi agitada a 80 °C (banho de óleo) durante 20 h. A mistura resultante foi arrefecida à temperatura ambiente e purificada por cromatografia em coluna usando metanol/acetato de etila (30:70) como eluentes.



2-Fenil-3-(fenilselanil)tieno[2,3-b]piridina-7-óxido 108:

Rend.: 0,066 g (69%); Sólido amarelado; P.F. = 199-201 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,31 (d, J = 6,2 Hz, 1H); 7,71-7,70 (m, 1H); 7,67-7,65 (m, 2H); 7,48-7,46 (m, 3H); 7,32-7,29 (m, 1H); 7,17-7,13 (m, 5H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 150,8; 148,7; 139,9; 134,6; 132,6; 131,4; 130,0; 129,8; 129,5; 129,47; 128,7; 126,7; 123,2; 122,0; 114,9. RMN DEPT-135 (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 134,6 (CH); 130,0 (2x CH); 129,8 (CH); 129,5 (2x CH); 129,47 (2x CH); 128,7 (2x CH); 126,7 (CH); 123,2 (CH); 122,0 (CH). RMN $^{77}\text{Se}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 76 MHz) δ (ppm) = 280,7. EM (rel. int., %) m/z : 383 (48,3); 367 (17,7); 287 (100,0); 210 (9,6); 139 (17,1). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{19}\text{H}_{14}\text{NOSSe}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 383,9961, encontrada: 383,9946.



2-Feniltieno[2,3-b]piridina-7-óxido 109:

Rend.: 0,042 g (74%); Sólido amarelado; P.F. = 133-135 °C; RMN ^1H (CDCl_3 , 400 MHz) δ (ppm) = 8,27 (d, J = 6,2 Hz, 1H); 7,72-7,67 (m, 3H); 7,49 (s, 1H); 7,47-7,42 (m, 3H); 7,30 (dd, J = 7,9 e 6,2 Hz, 1H). RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 146,5; 137,9; 134,1; 132,7; 129,6; 129,3; 126,6; 121,7; 121,6; 117,6. RMN DEPT-135 (CDCl_3 , 100 MHz) δ (ppm) = 134,1 (CH); 129,7 (CH); 129,3 (2x CH); 126,6 (2x CH); 121,7 (CH); 121,6 (CH); 117,6 (CH). EM (rel. int., %) m/z : 227 (100,0); 211 (56,2); 198 (31,7); 139 (18,9); 102 (6,7). EMAR (APCI-QTOF) massa calculada para $\text{C}_{13}\text{H}_{10}\text{NOS}$ $[\text{M}+\text{H}]^+$: 228,0483, encontrada: 228,0480.

6. Espectros Seleccionados

6. Espectros Seleccionados

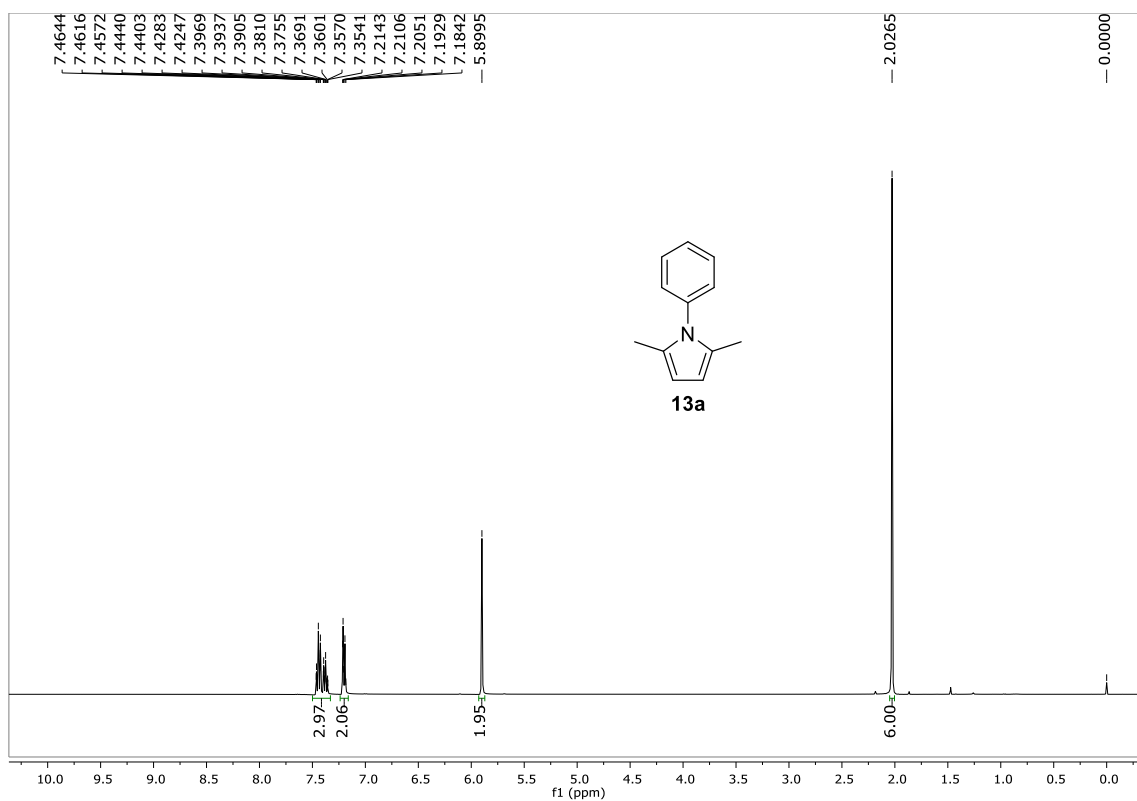


Figura 35. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **13a**.

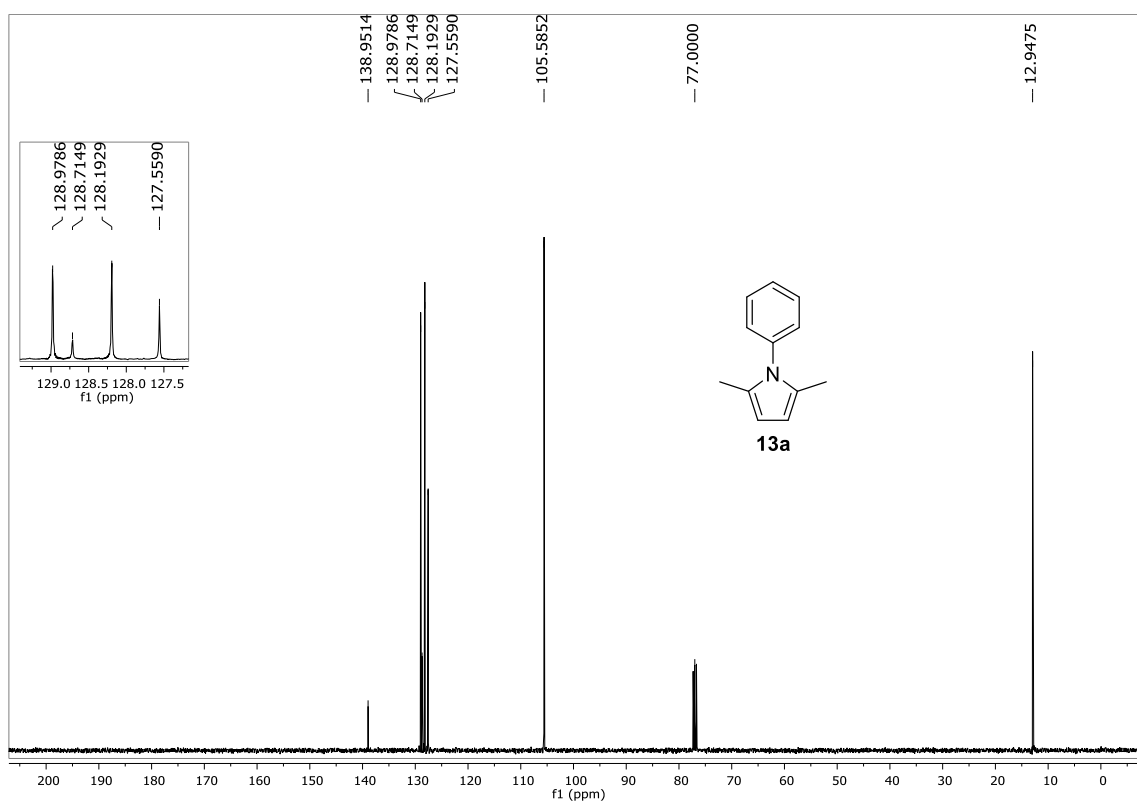


Figura 36. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **13a**.

6. Espectros Seleccionados

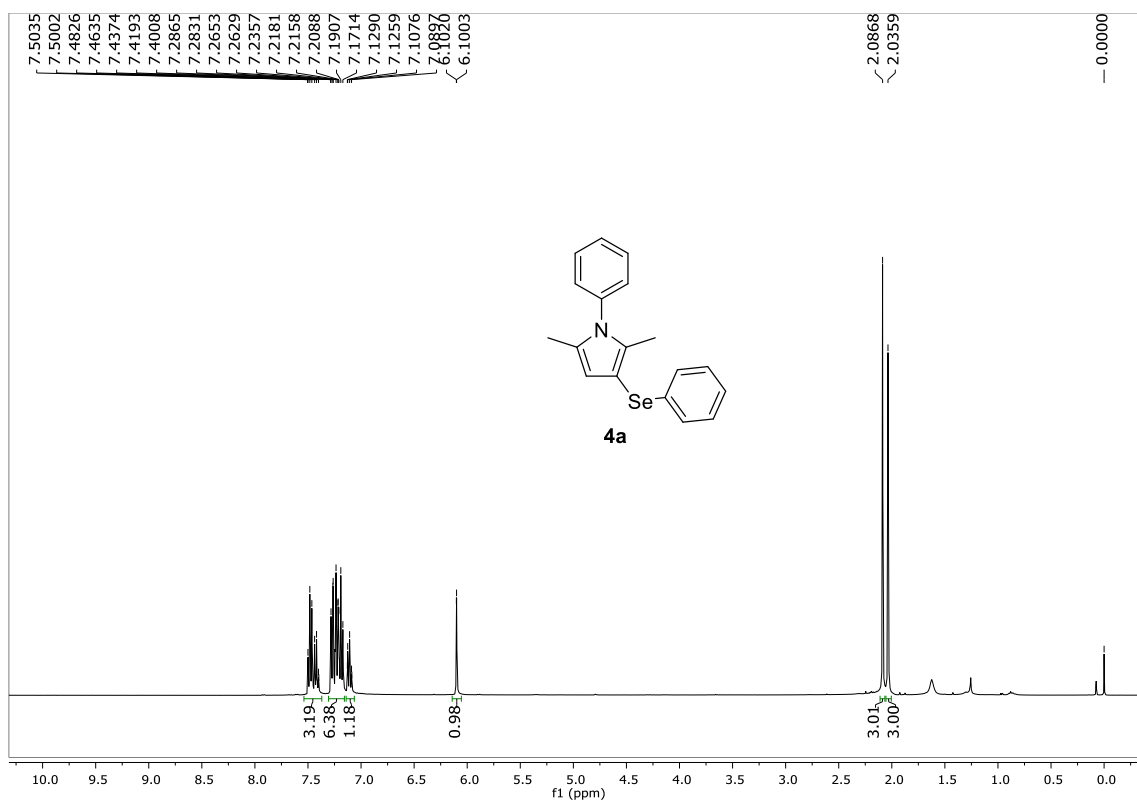


Figura 37. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **4a**.

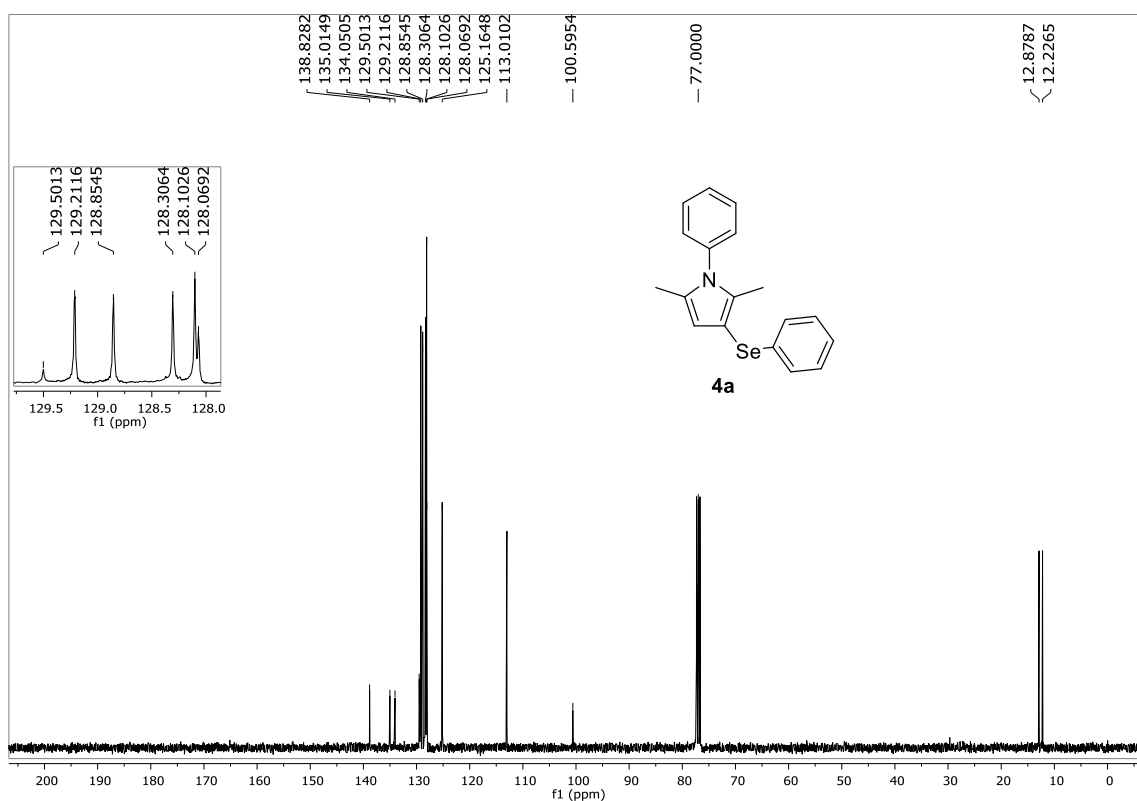


Figura 38. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **4a**.

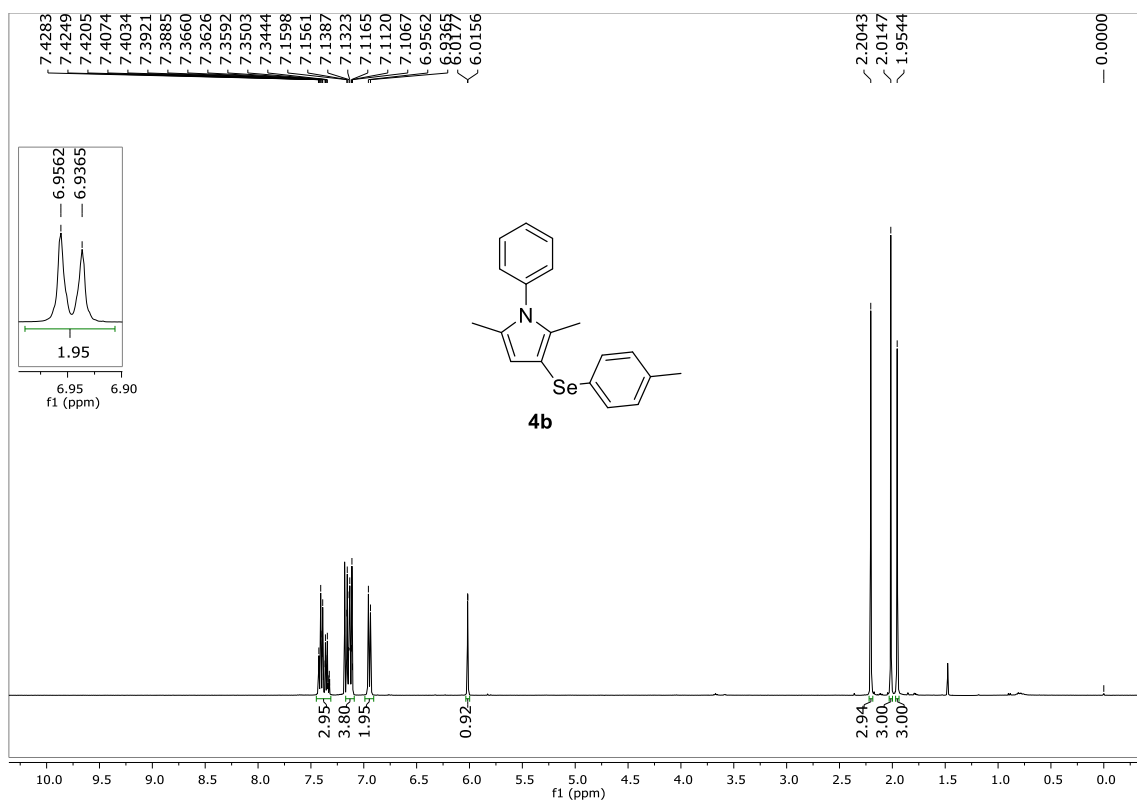


Figura 39. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **4b**.

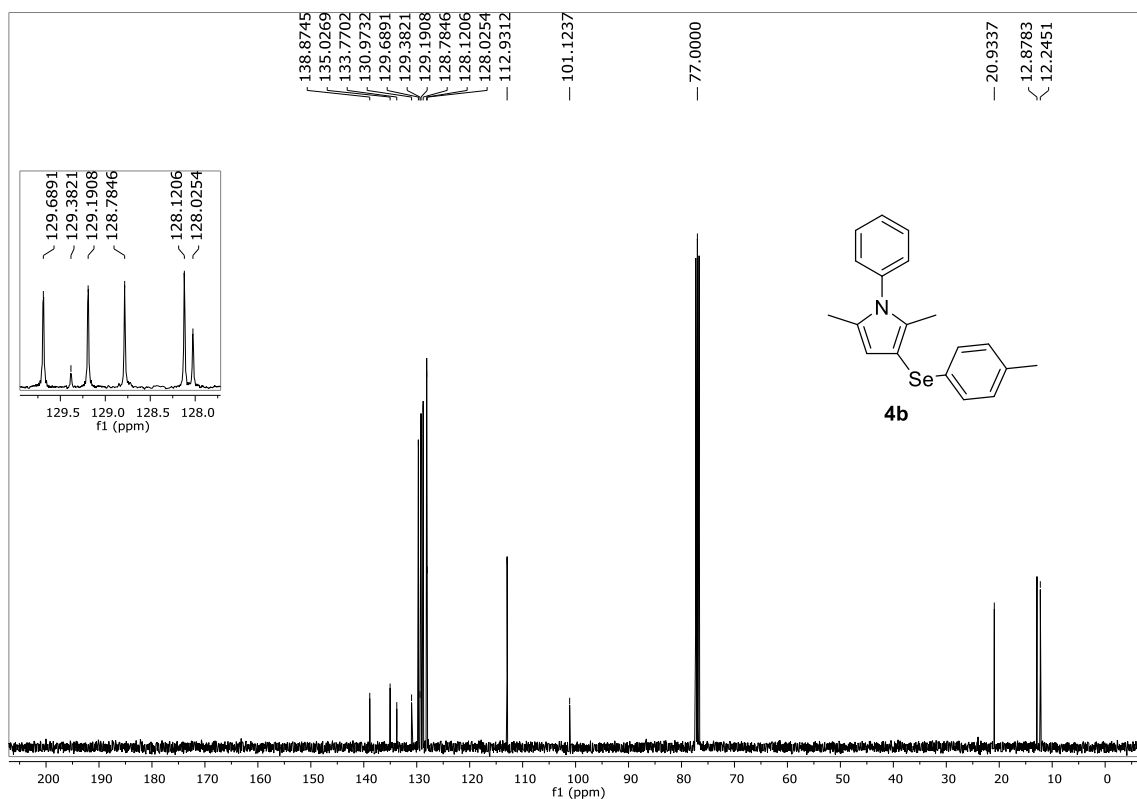


Figura 40. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **4b**.

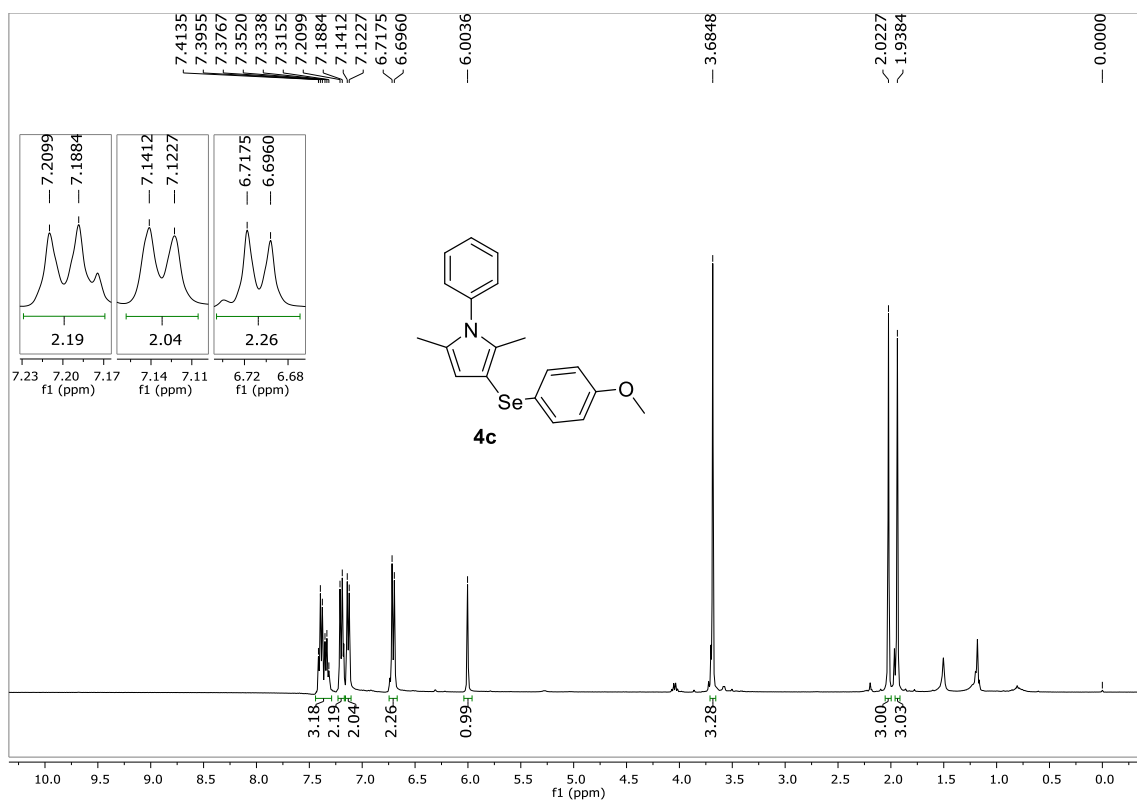


Figura 41. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **4c**.

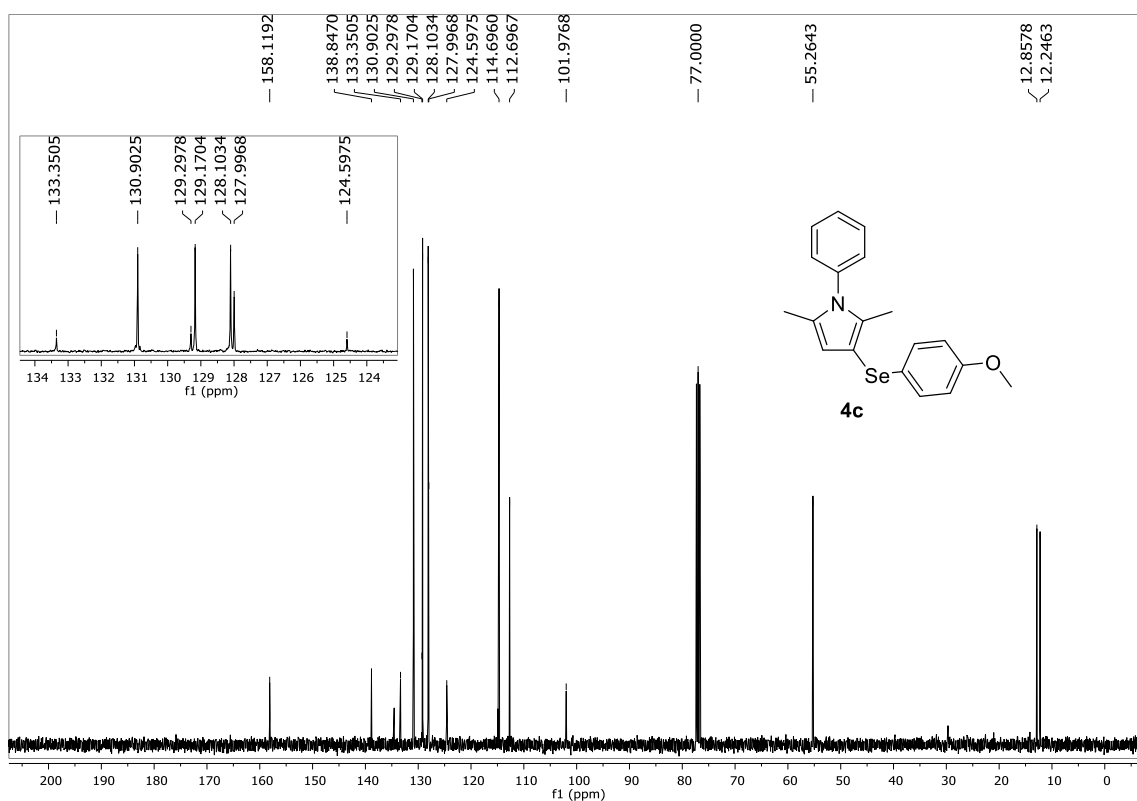


Figura 42. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **4c**.

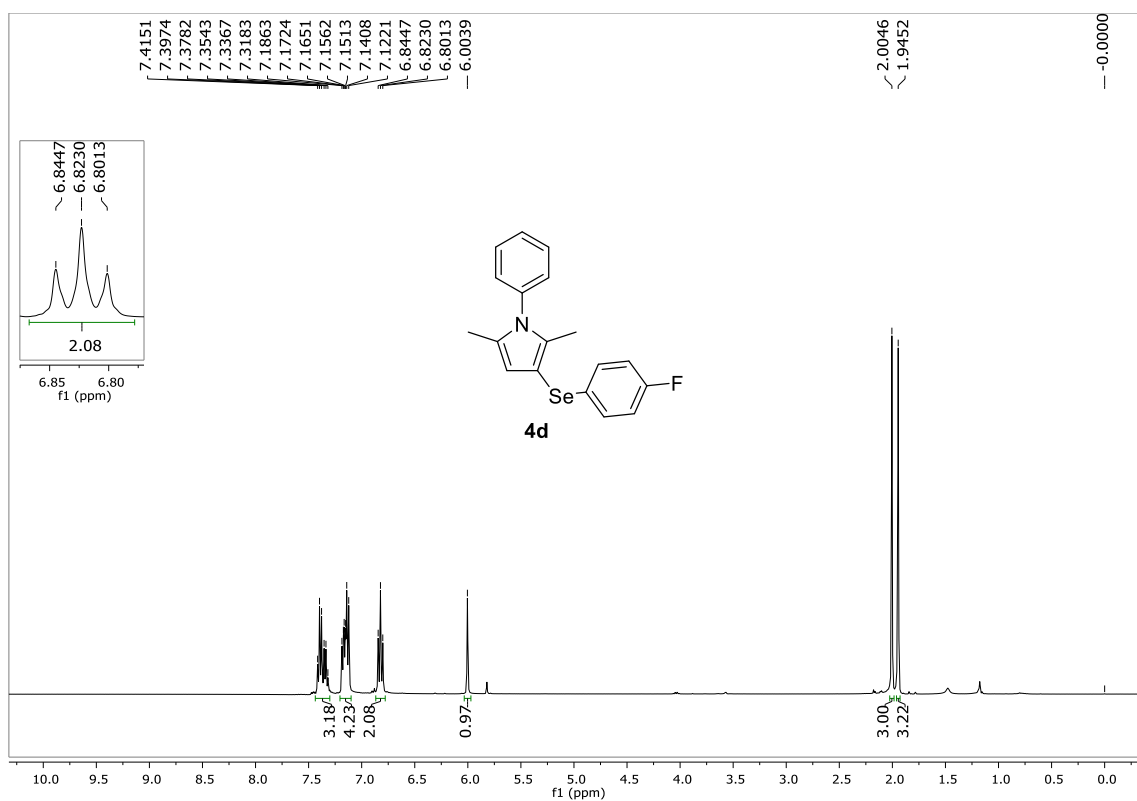


Figura 43. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **4d**.

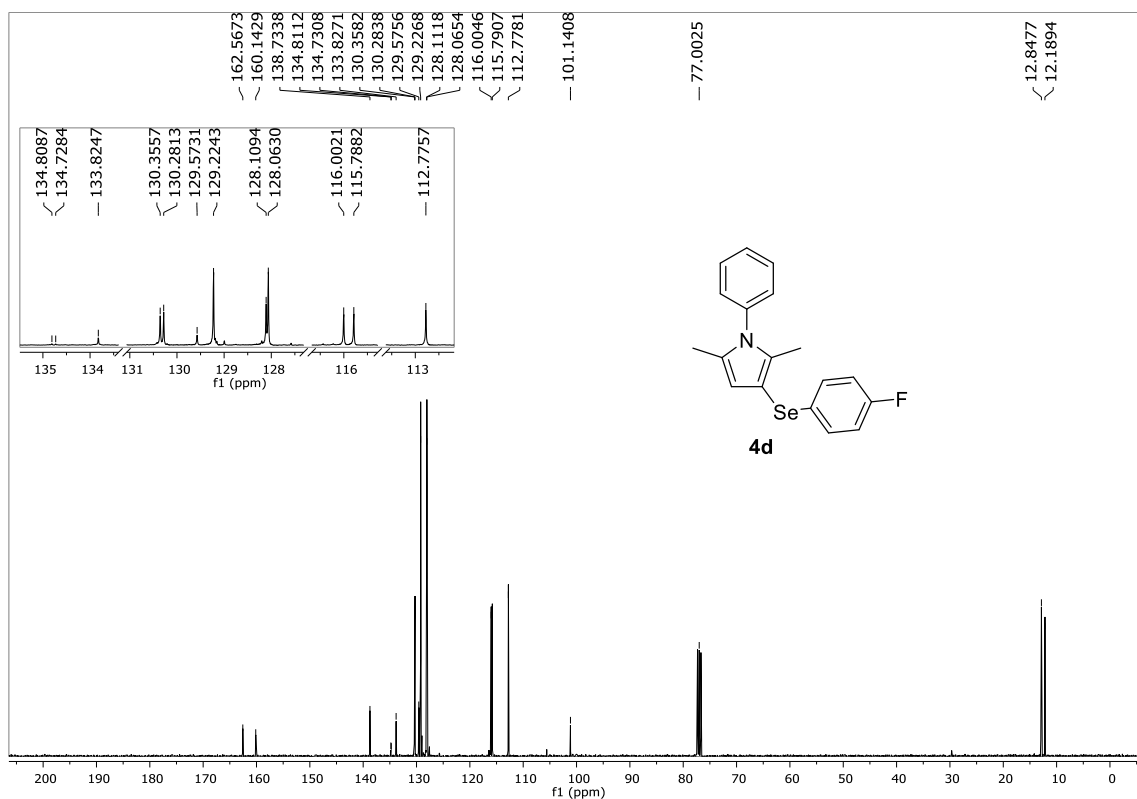


Figura 44. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **4d**.

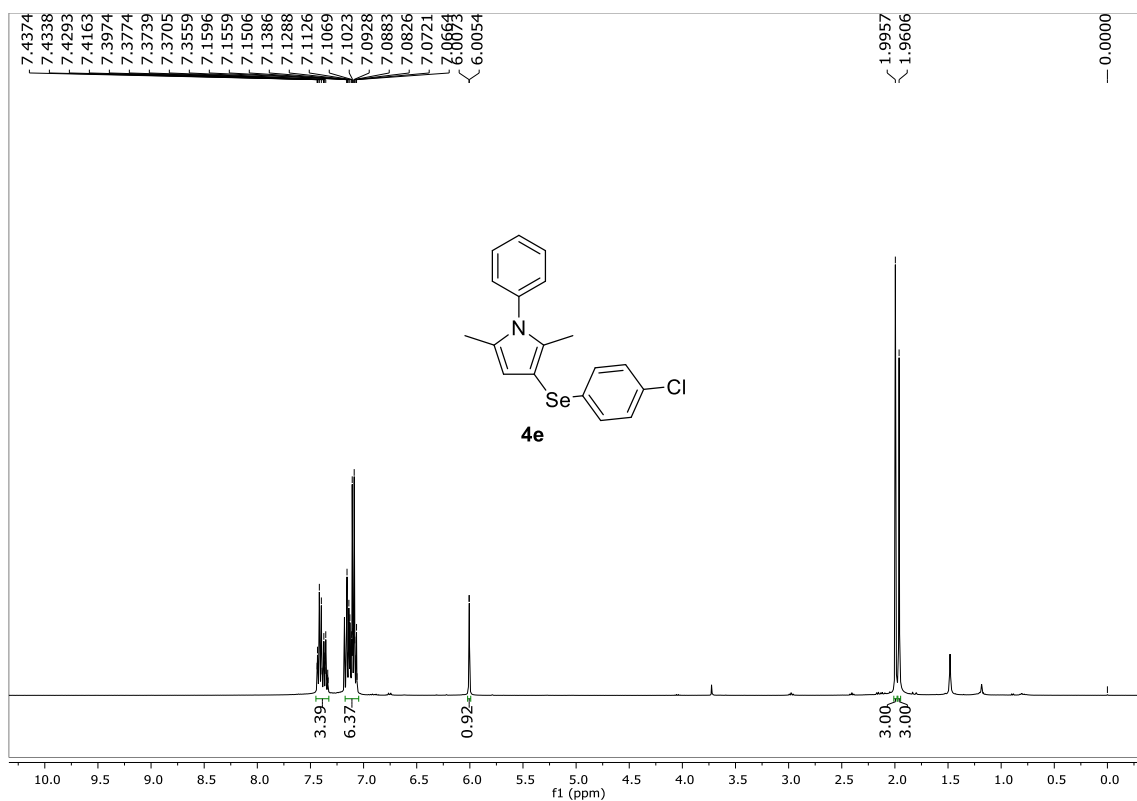


Figura 45. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **4e**.

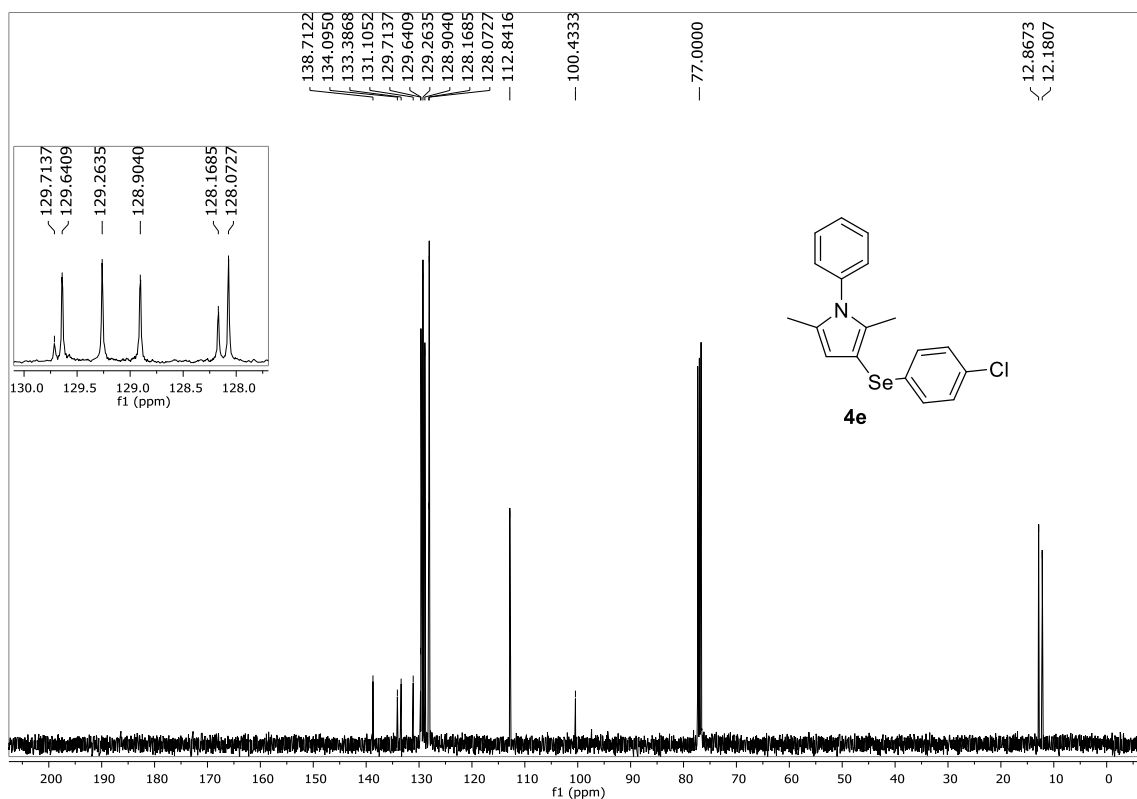


Figura 46. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **4e**.

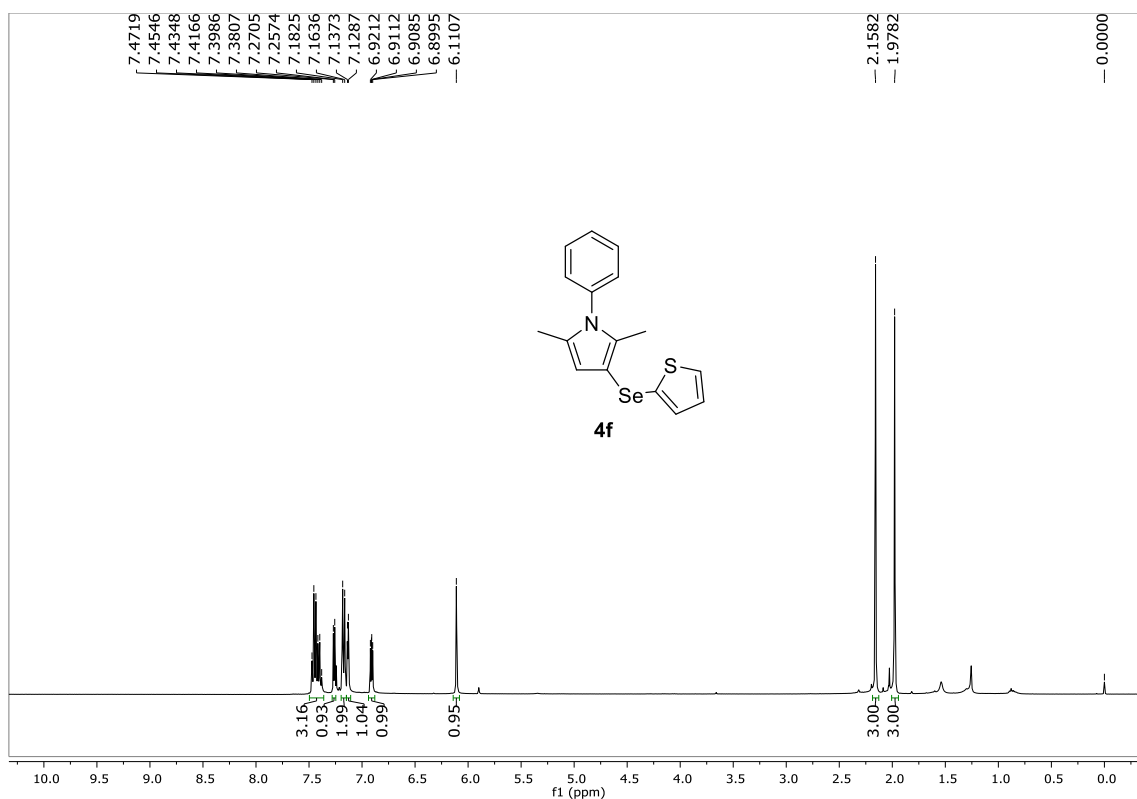


Figura 47. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 4f.

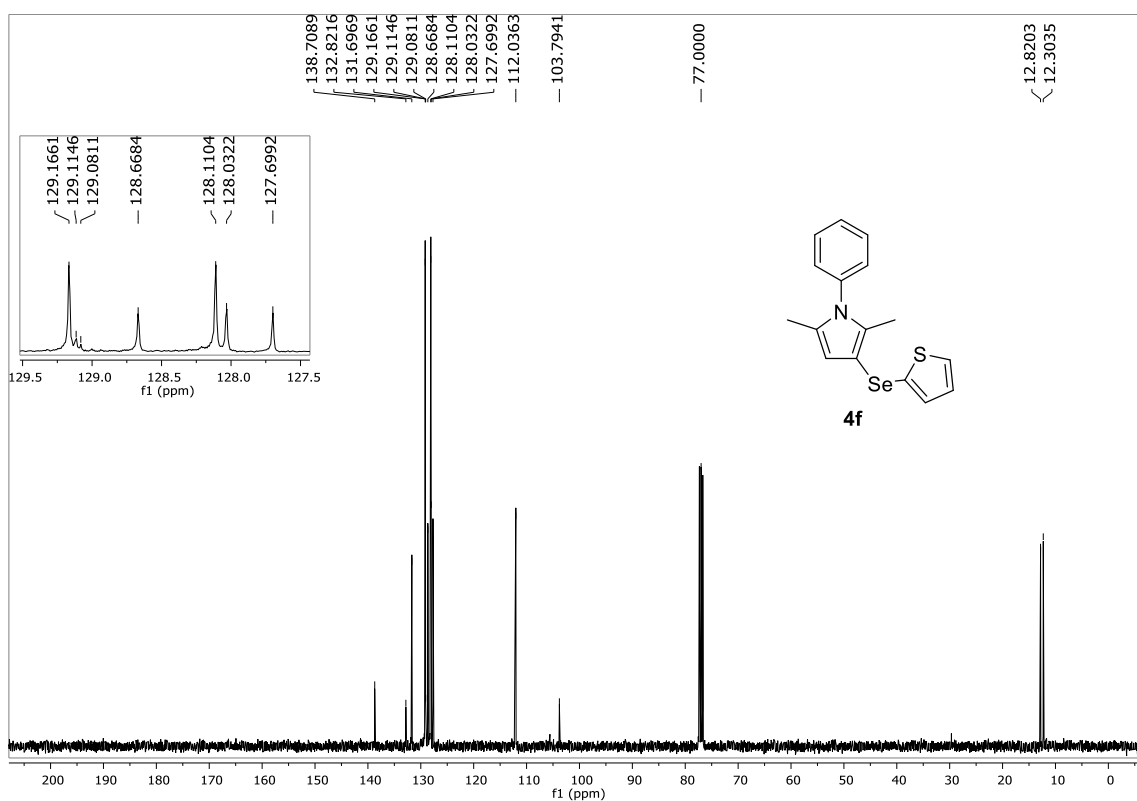


Figura 48. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 4f.

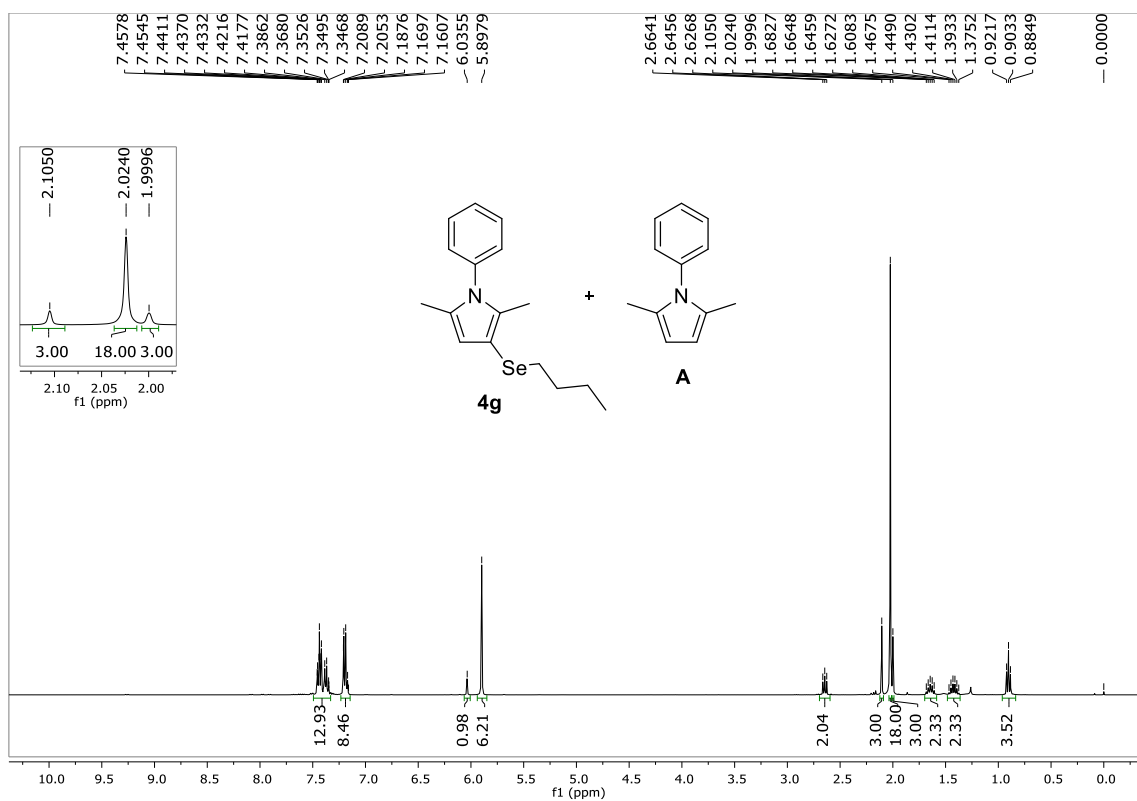


Figura 49. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **4g**.

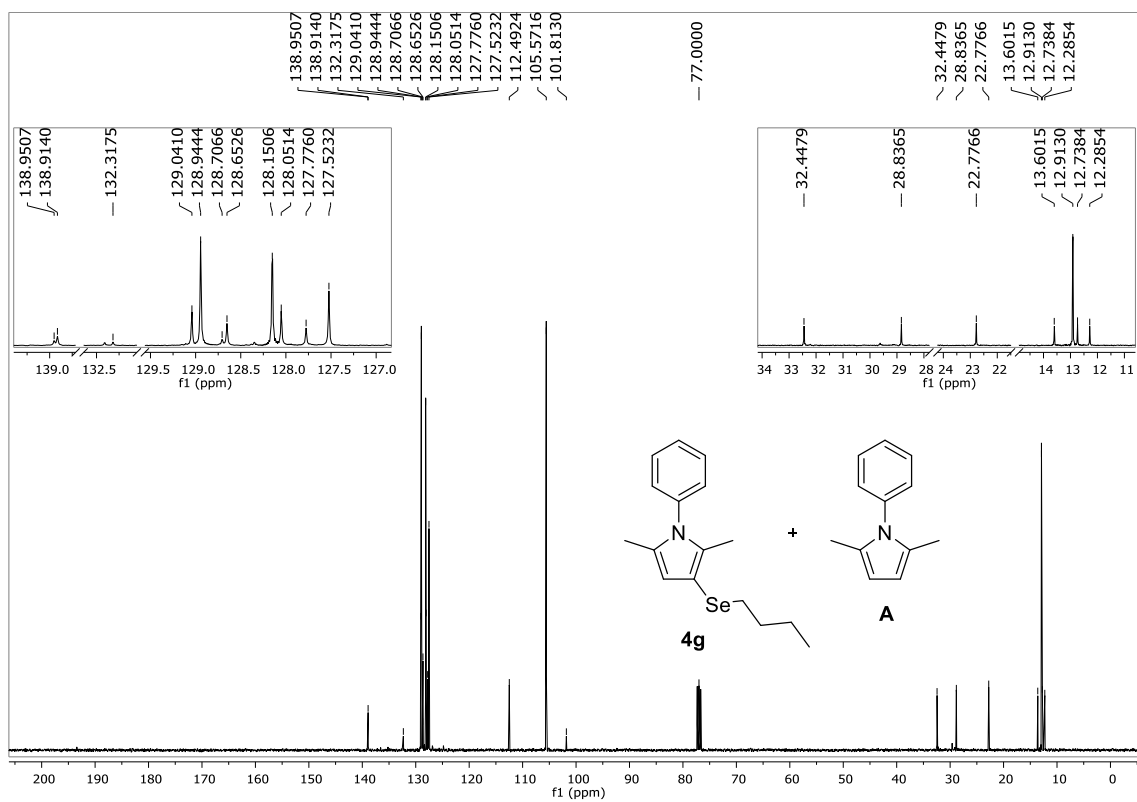


Figura 50. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **4g**.

6. Espectros Seleccionados

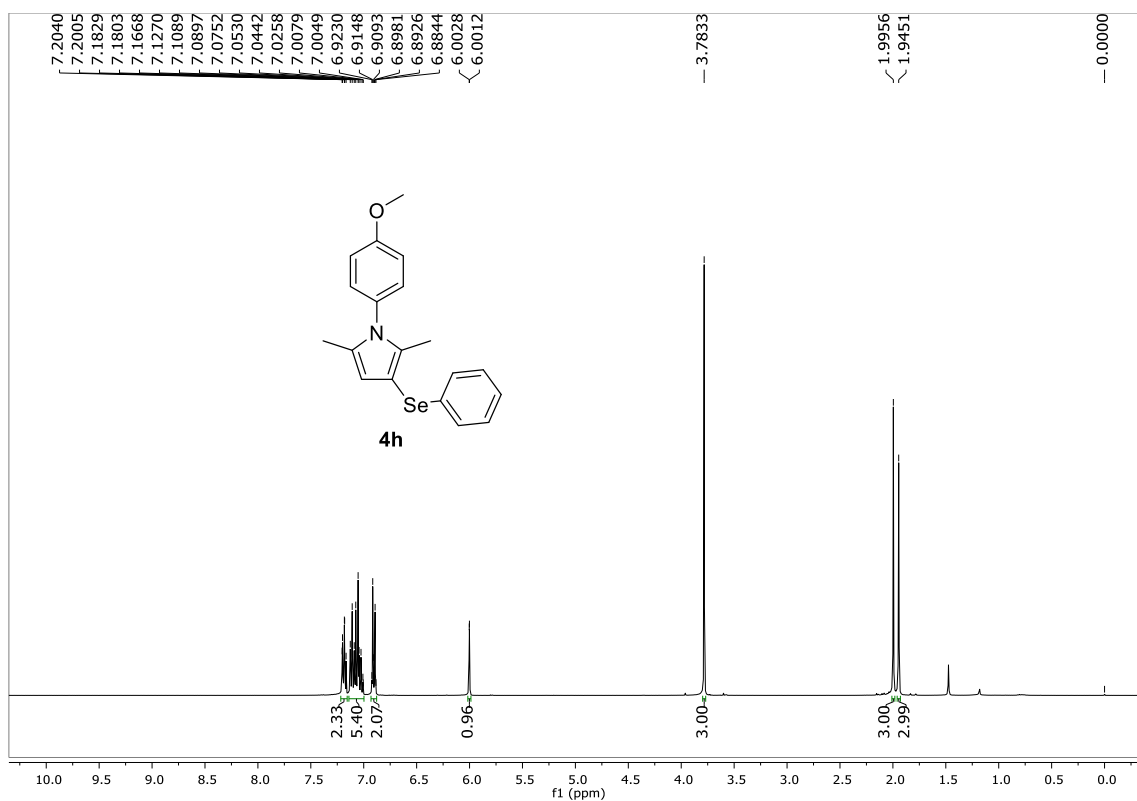


Figura 51. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **4h**.

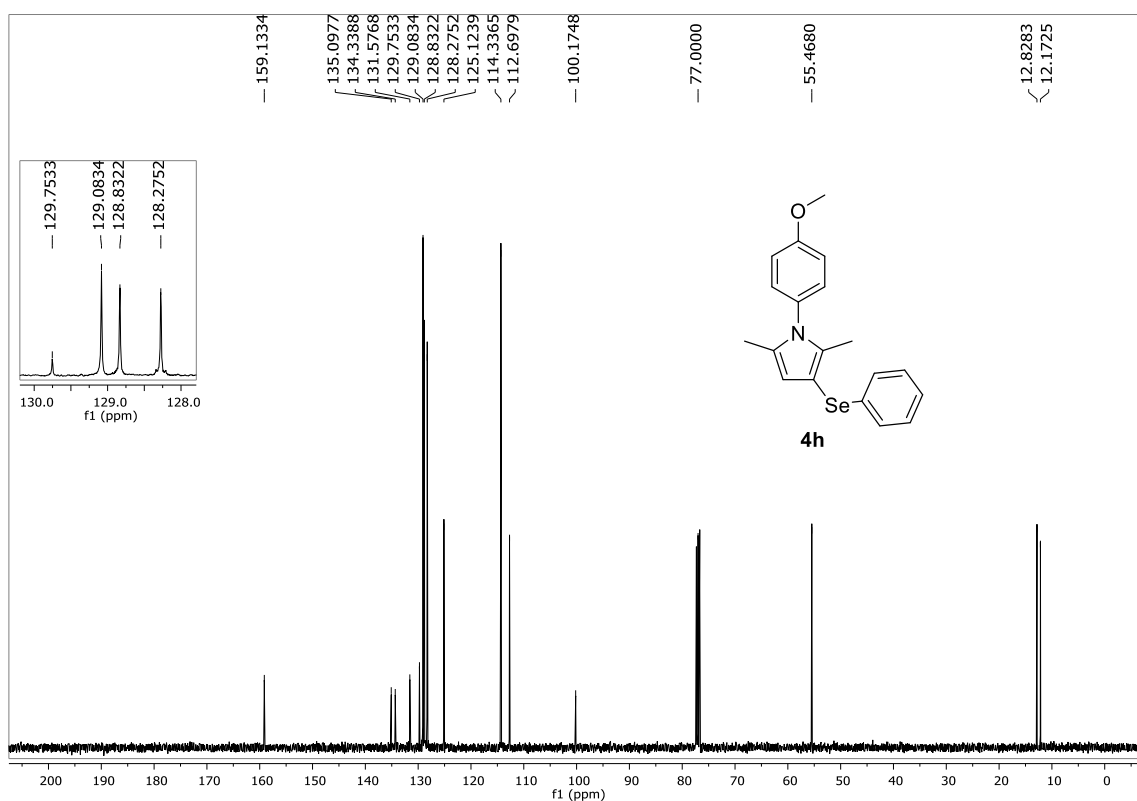


Figura 52. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **4h**.

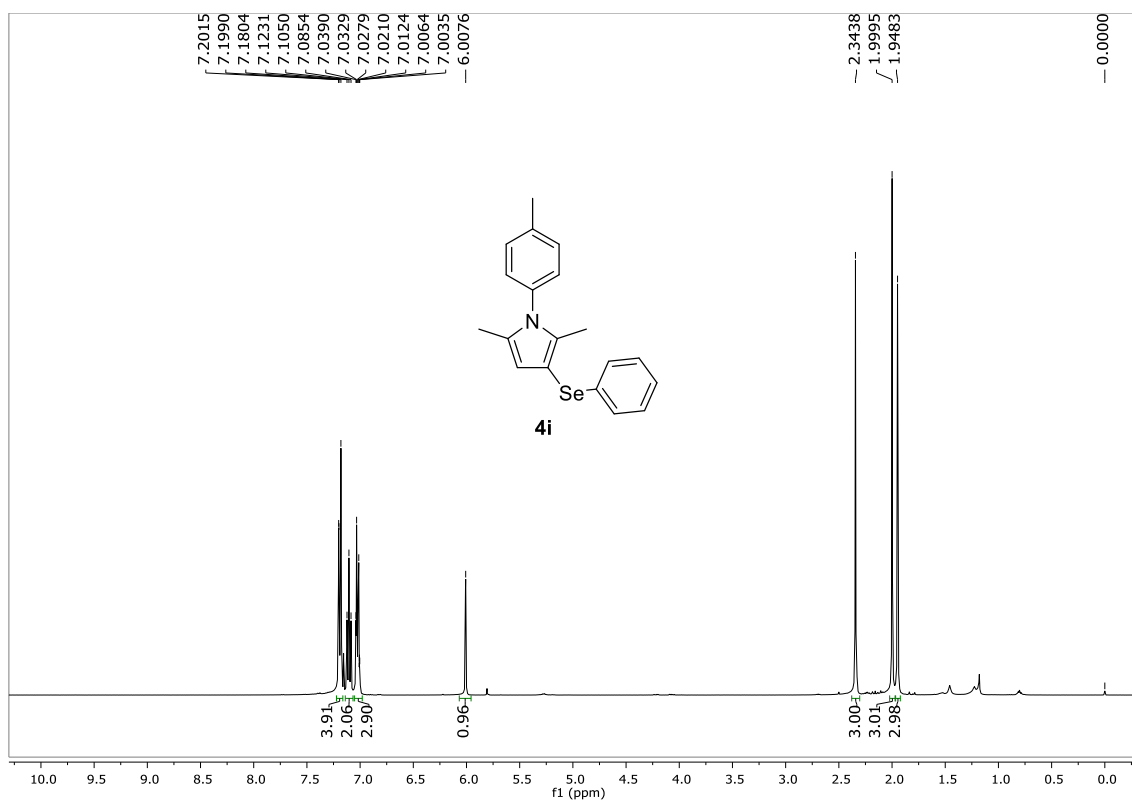


Figura 53. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **4i**.

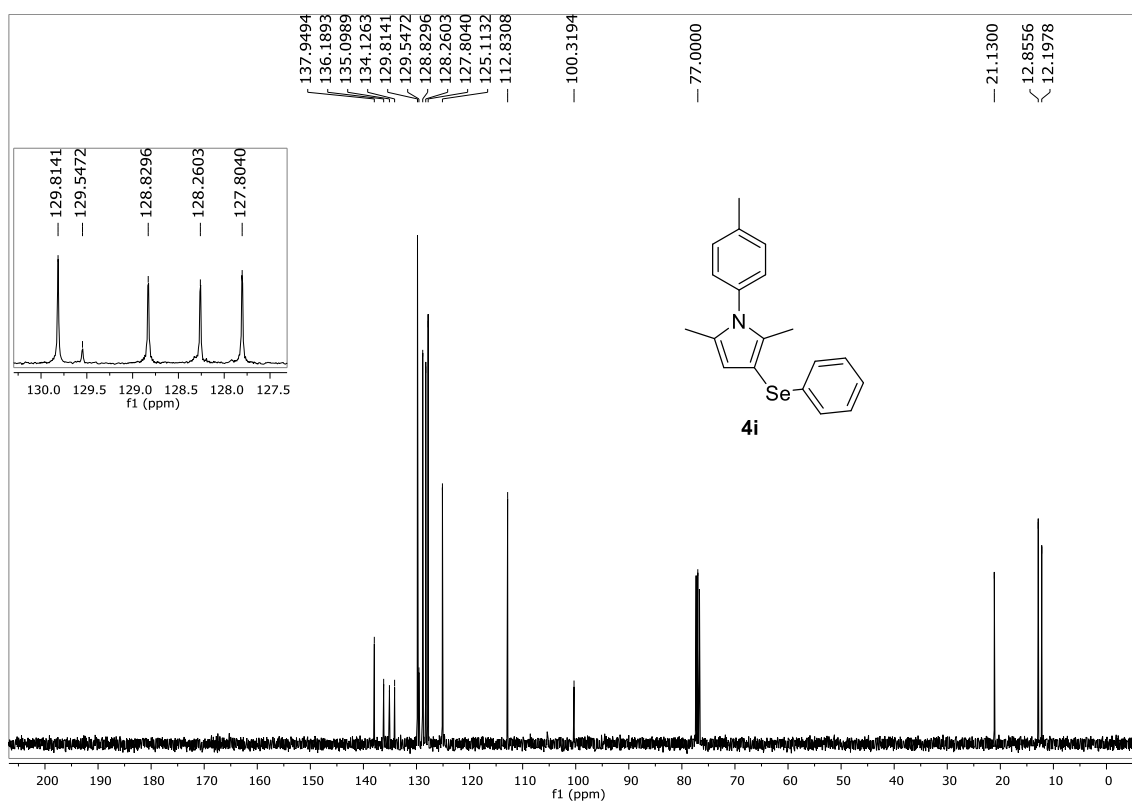


Figura 54. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **4i**.

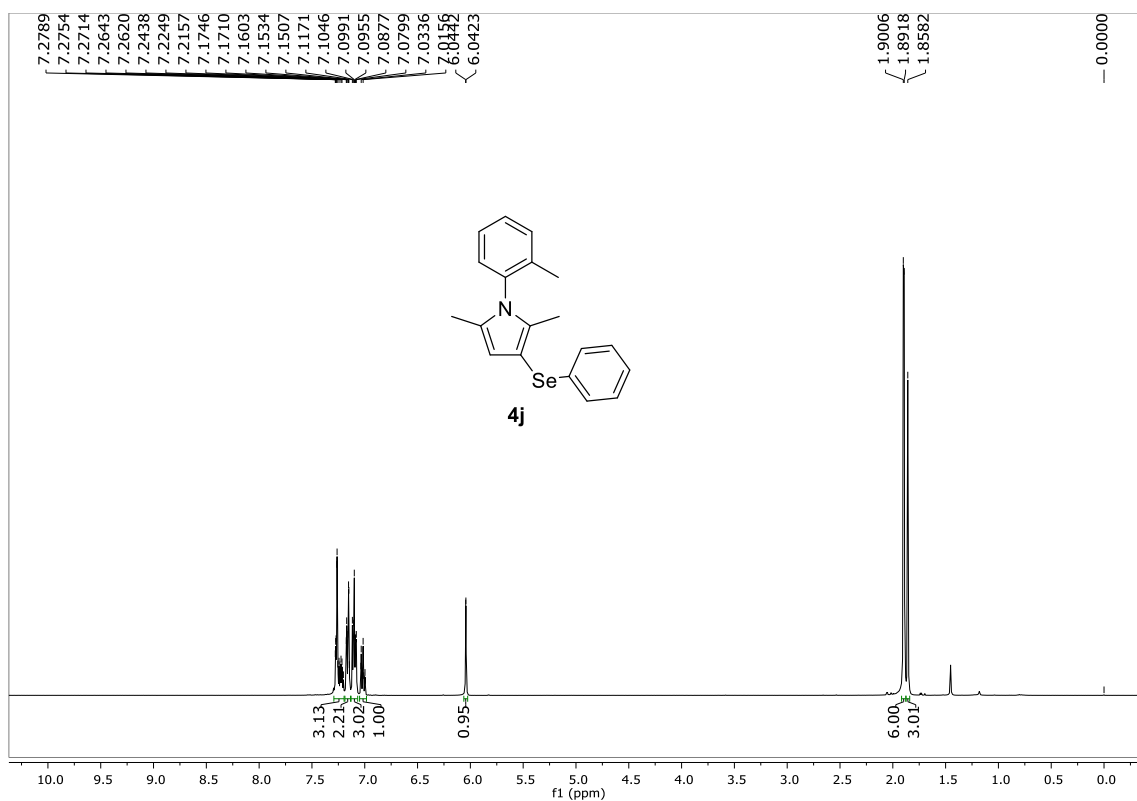


Figura 55. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 4j.

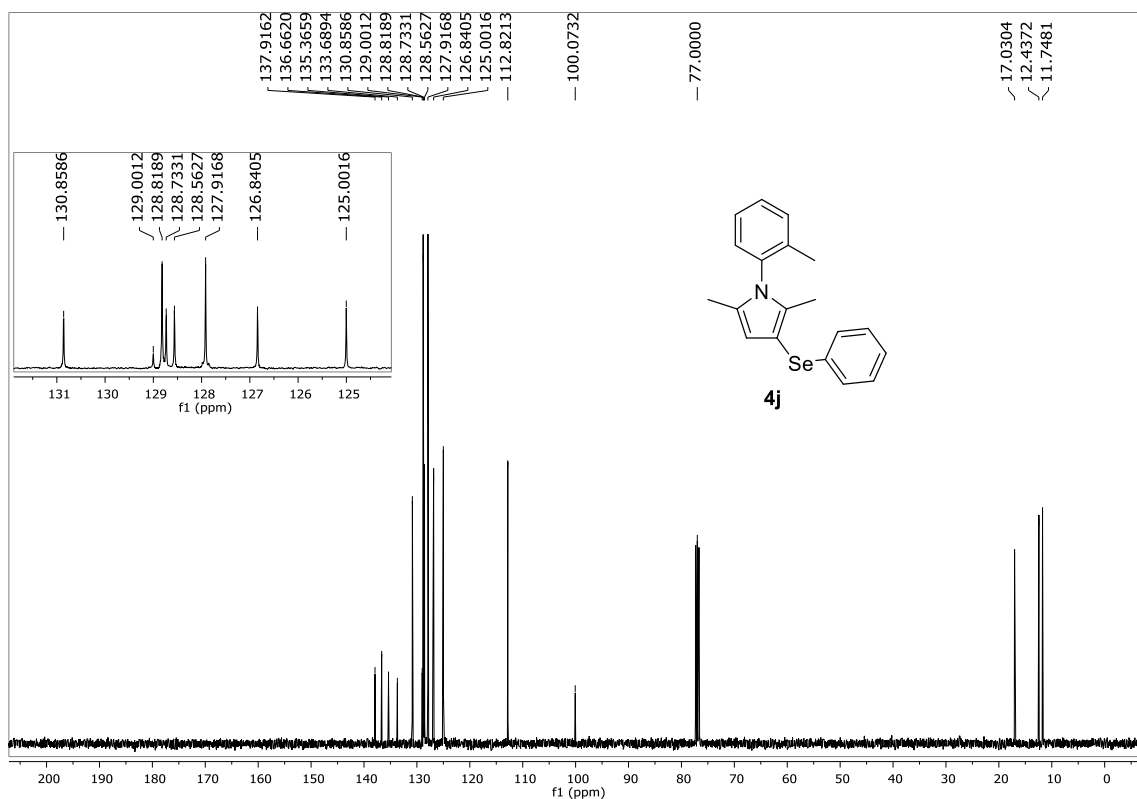


Figura 56. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 4j.

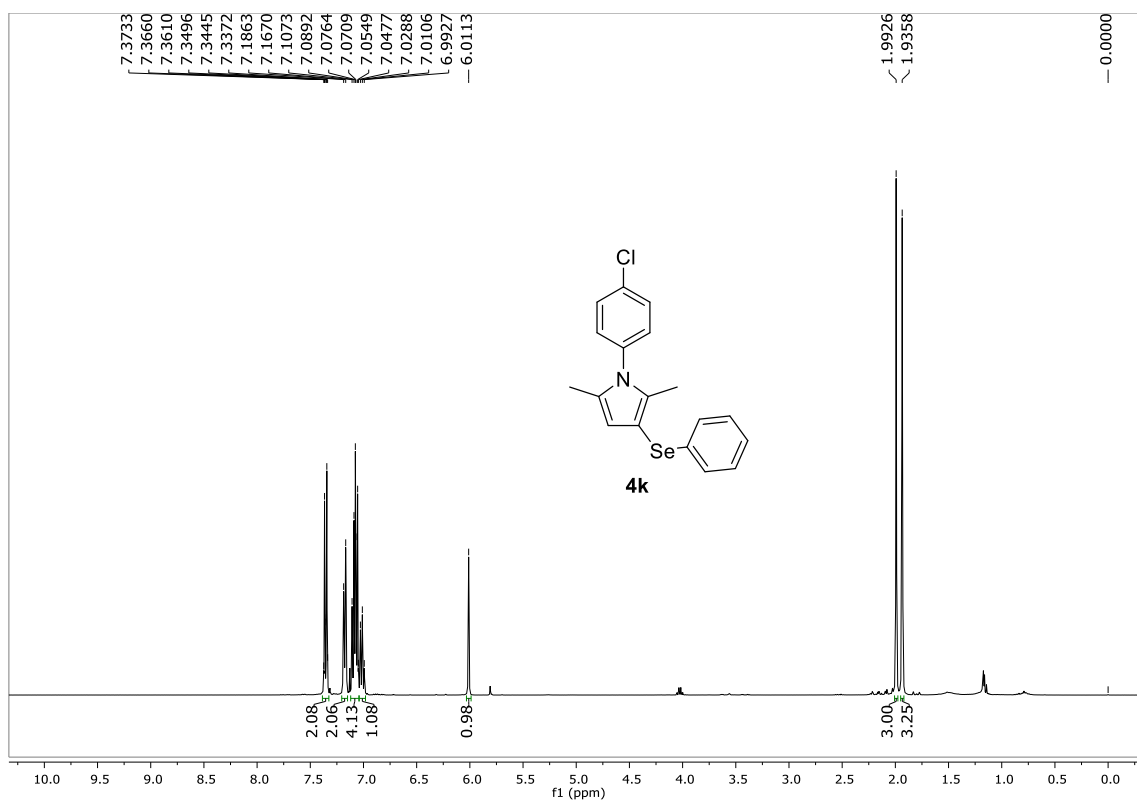


Figura 57. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 4k.

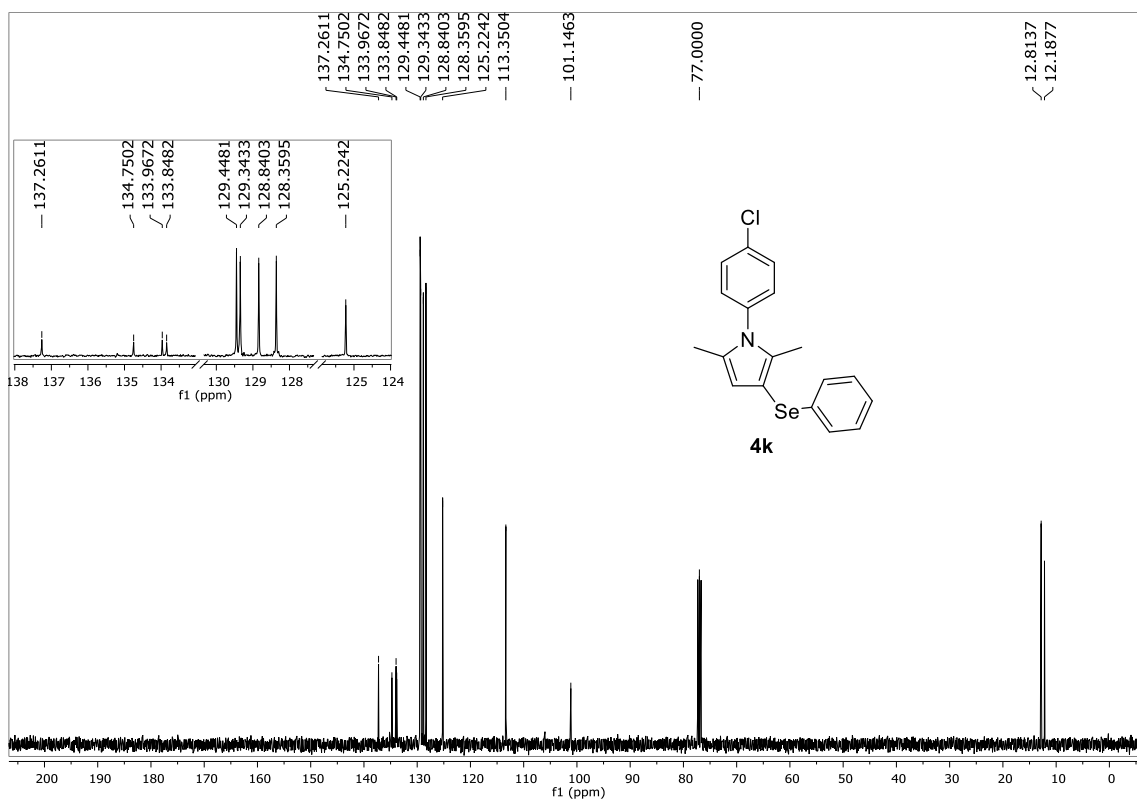


Figura 58. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 4k.

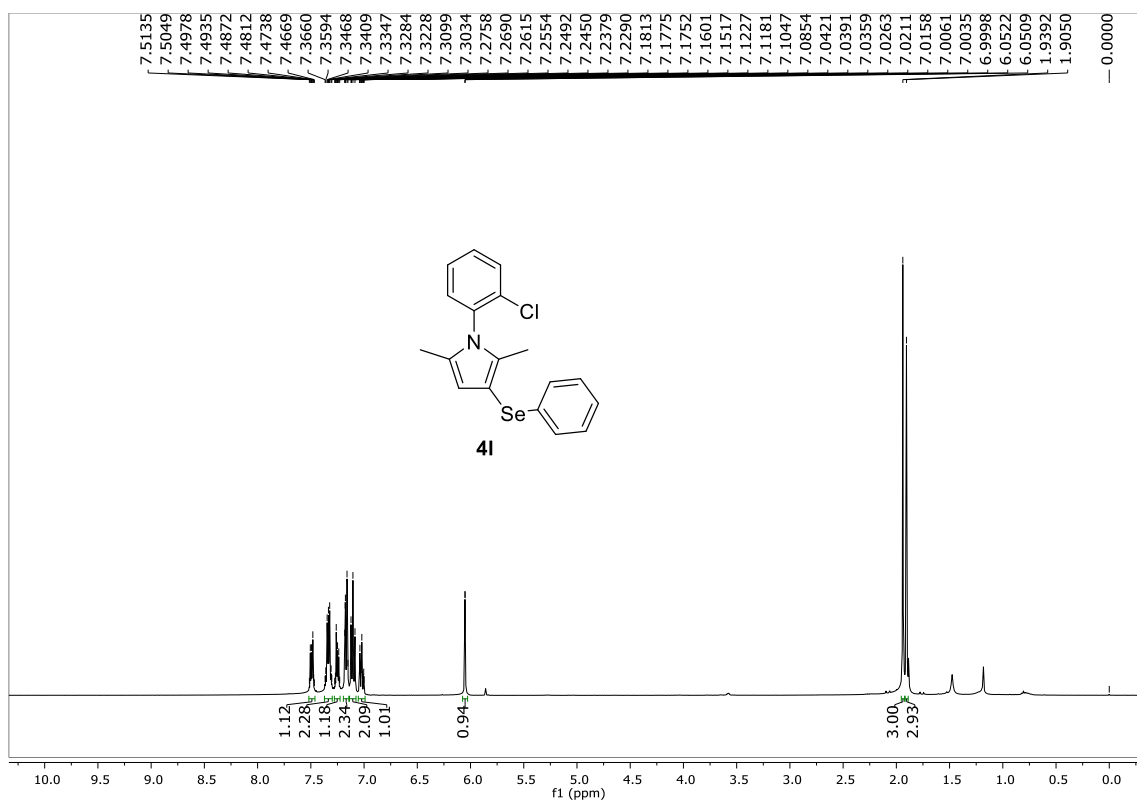


Figura 59. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 4I.

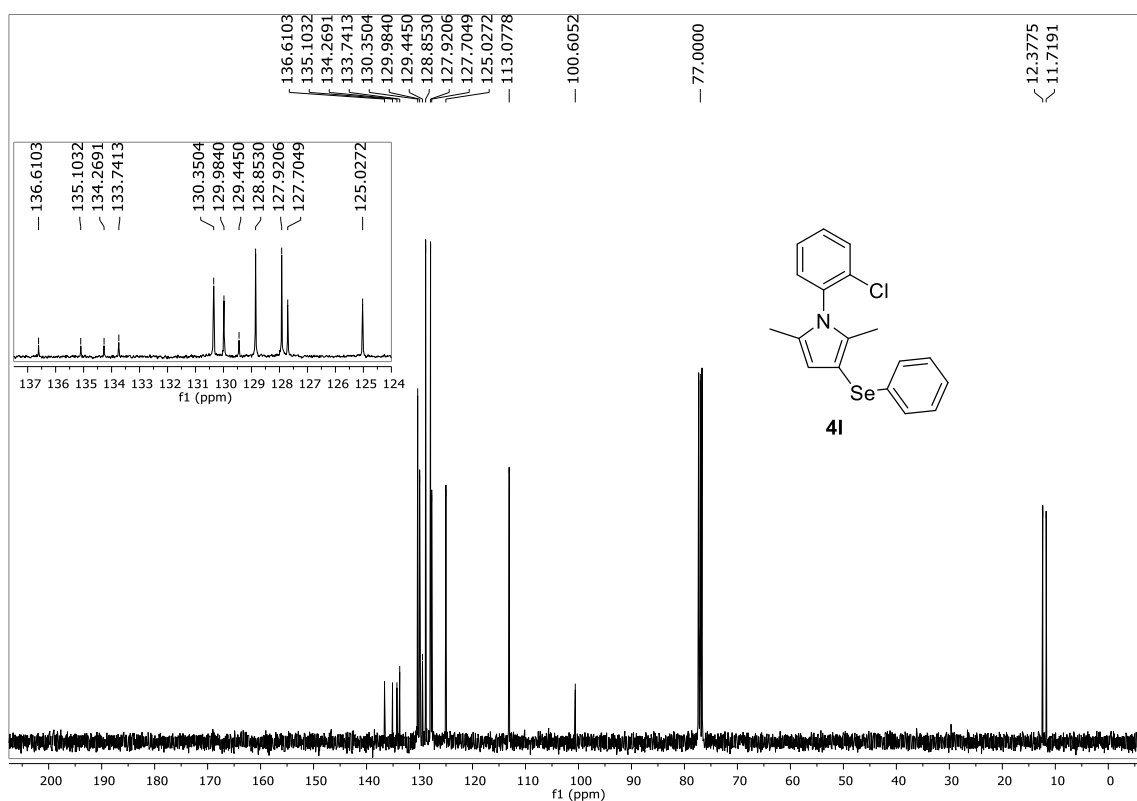


Figura 60. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 4I.

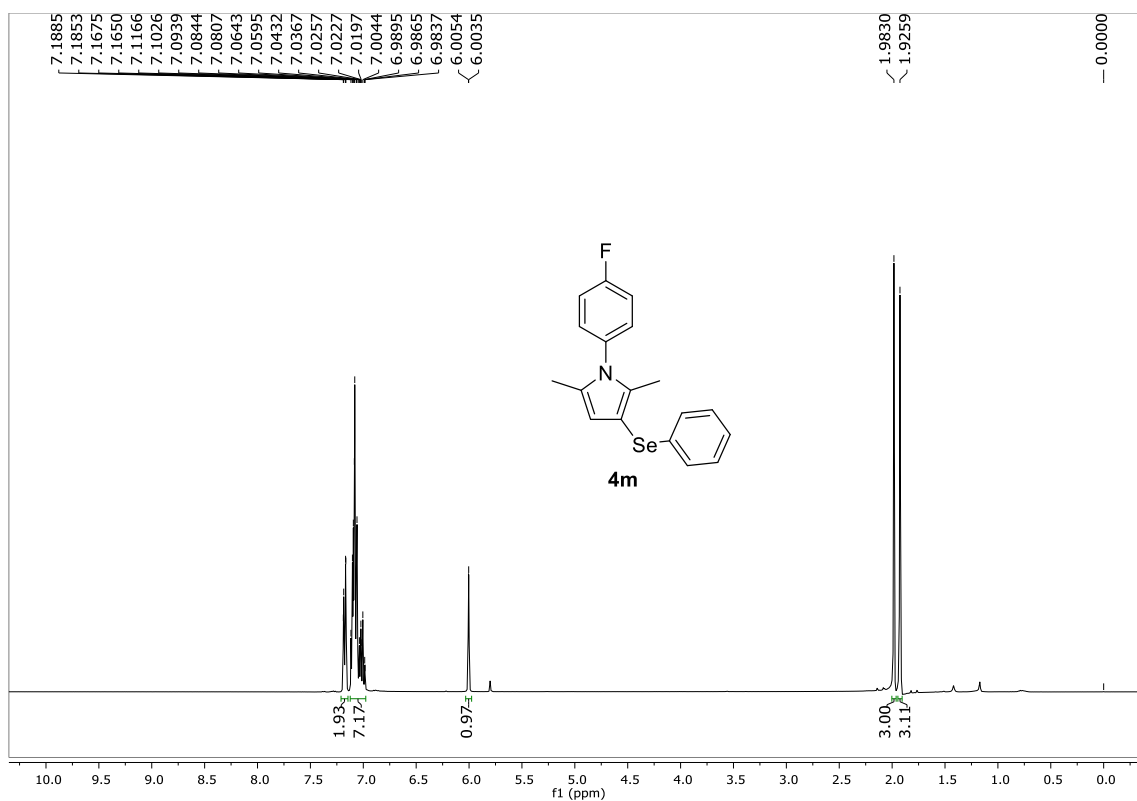


Figura 61. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 4m.

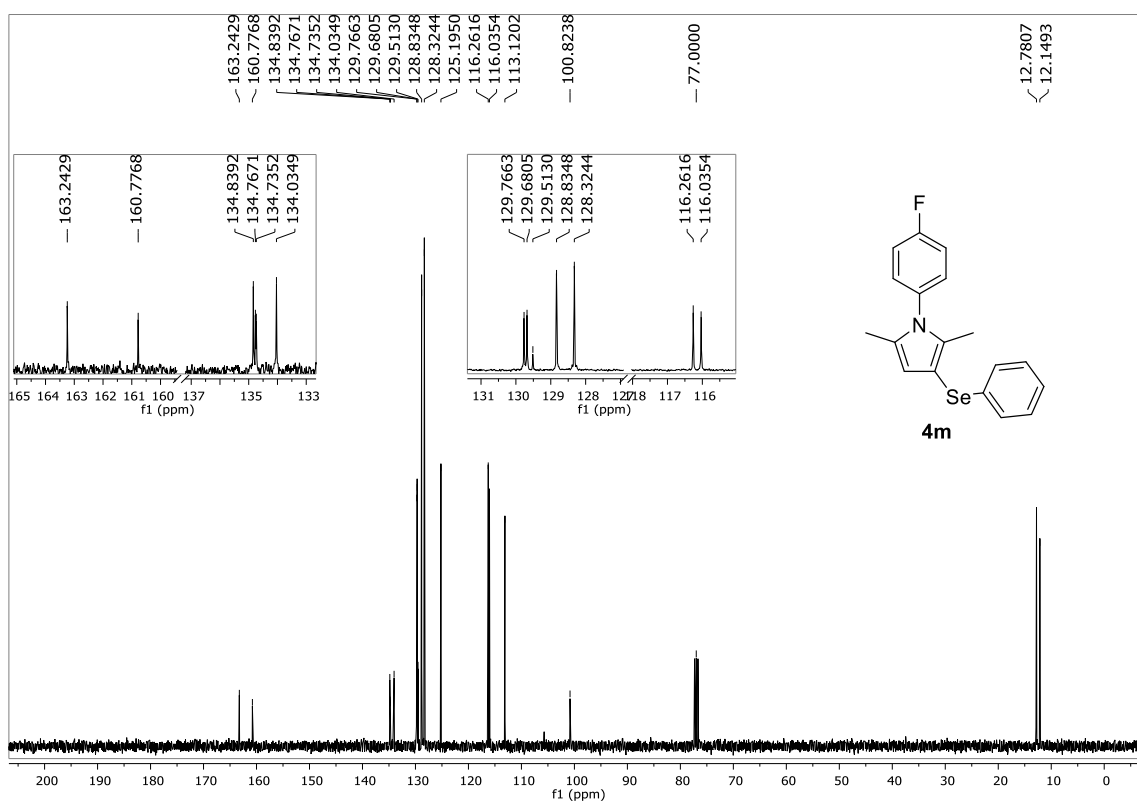


Figura 62. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 4m.

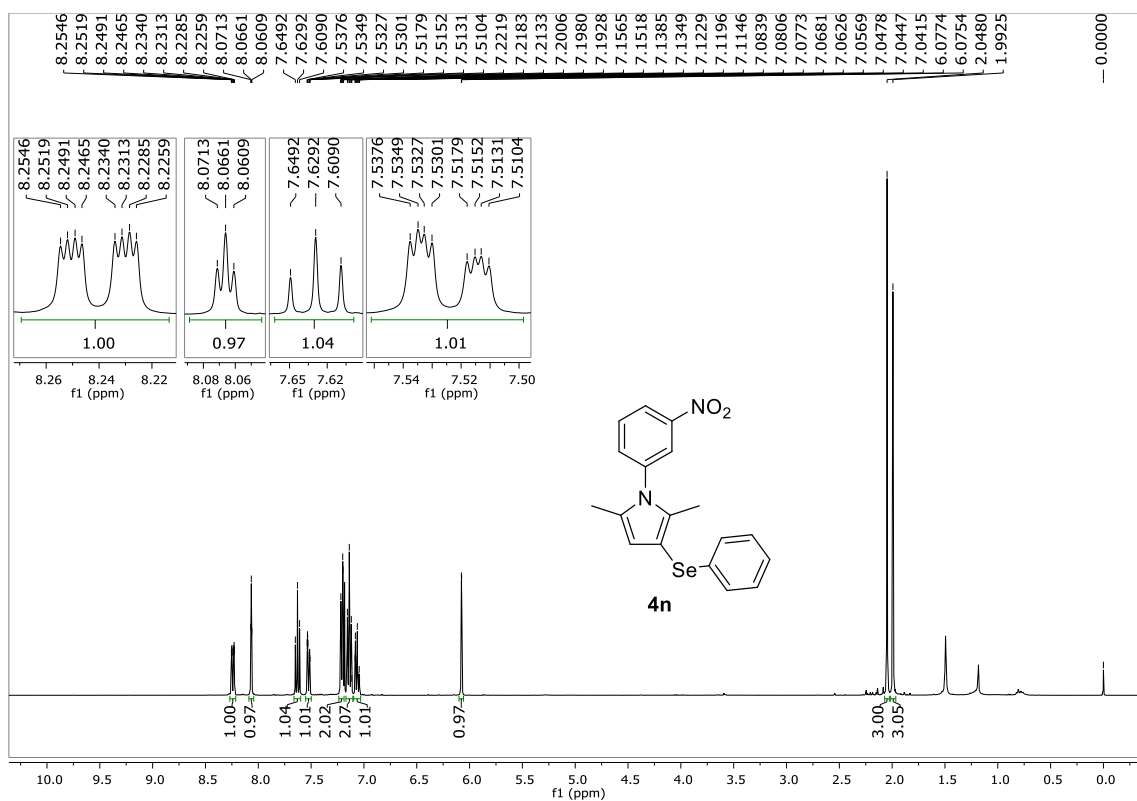


Figura 63. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **4n**.

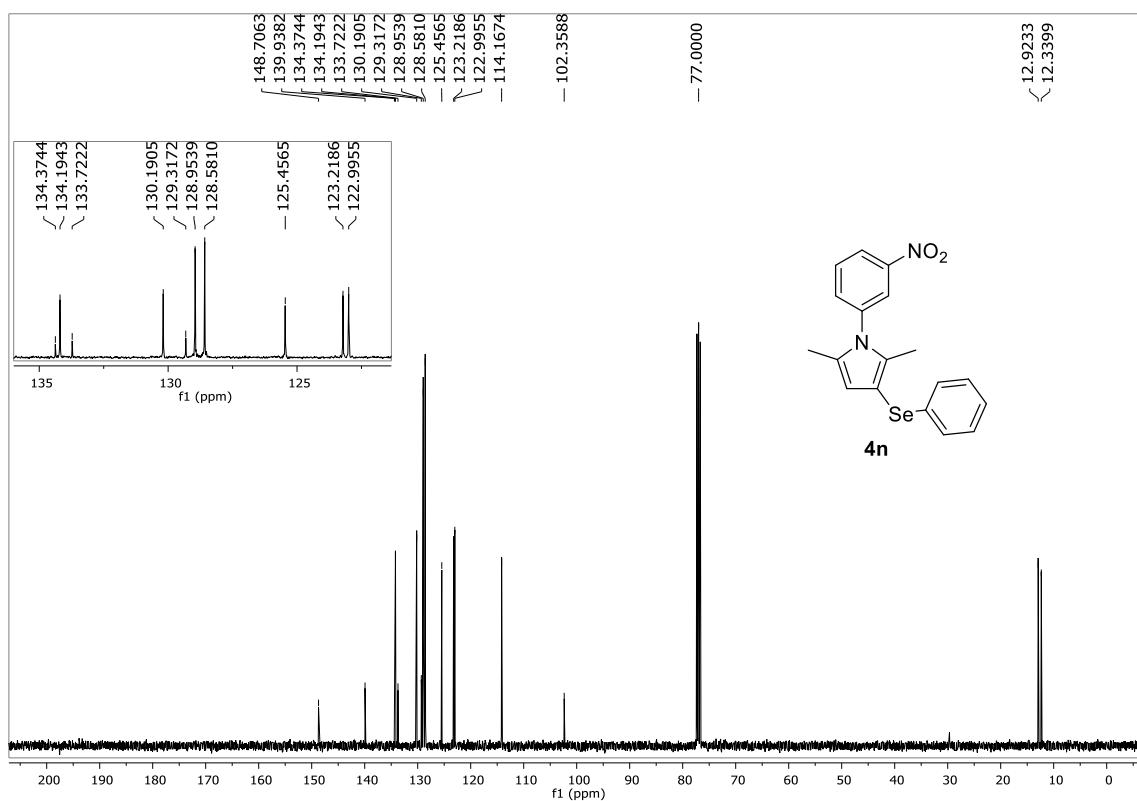


Figura 64. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **4n**.

6. Espectros Seleccionados

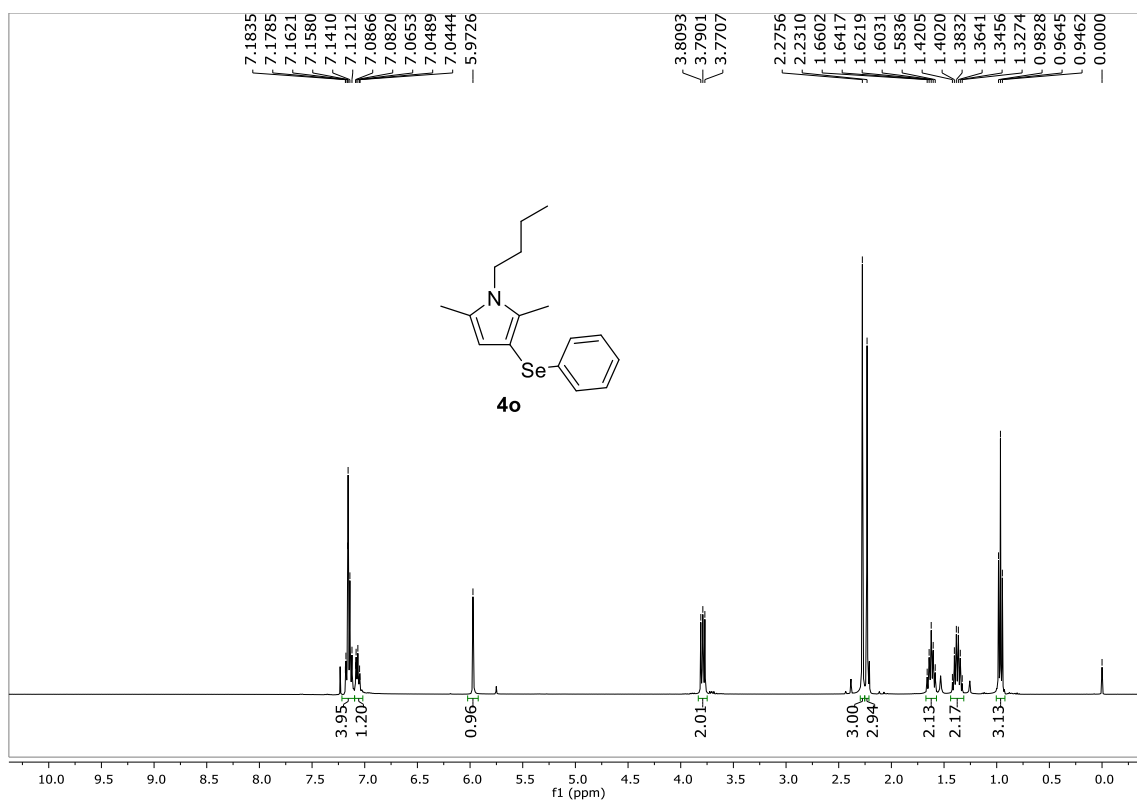


Figura 65. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **4o**.

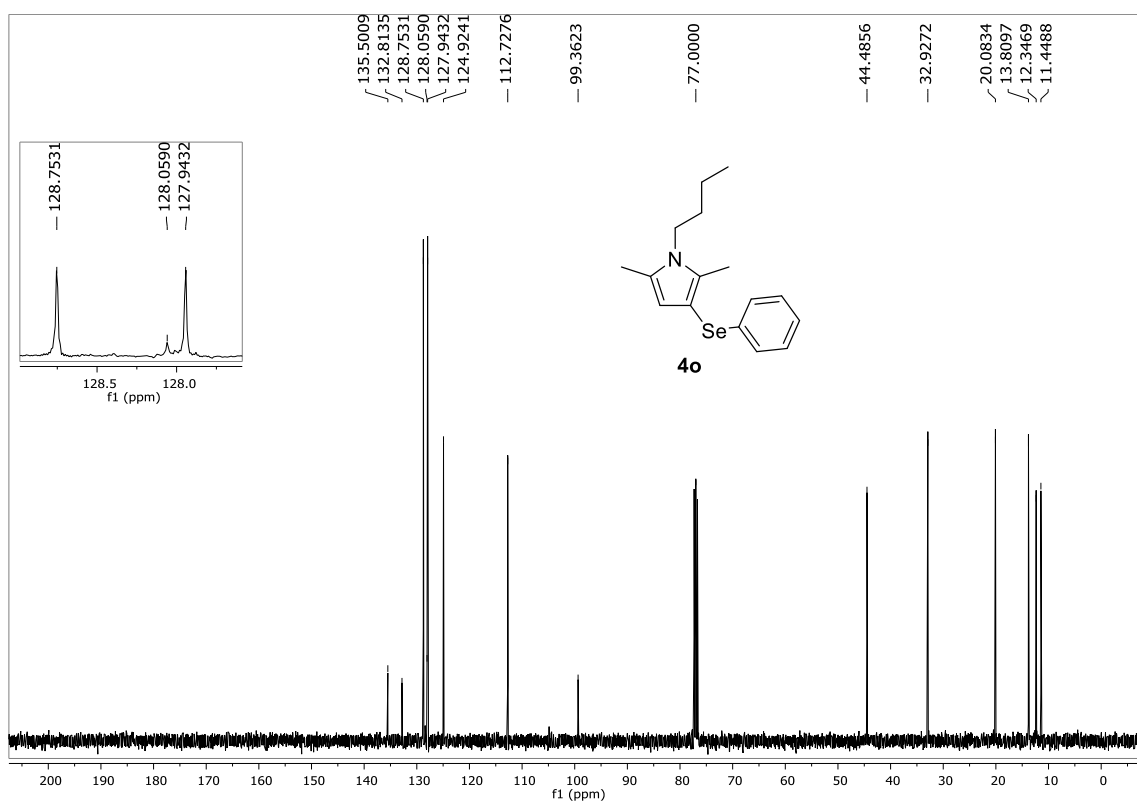


Figura 66. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **4o**.

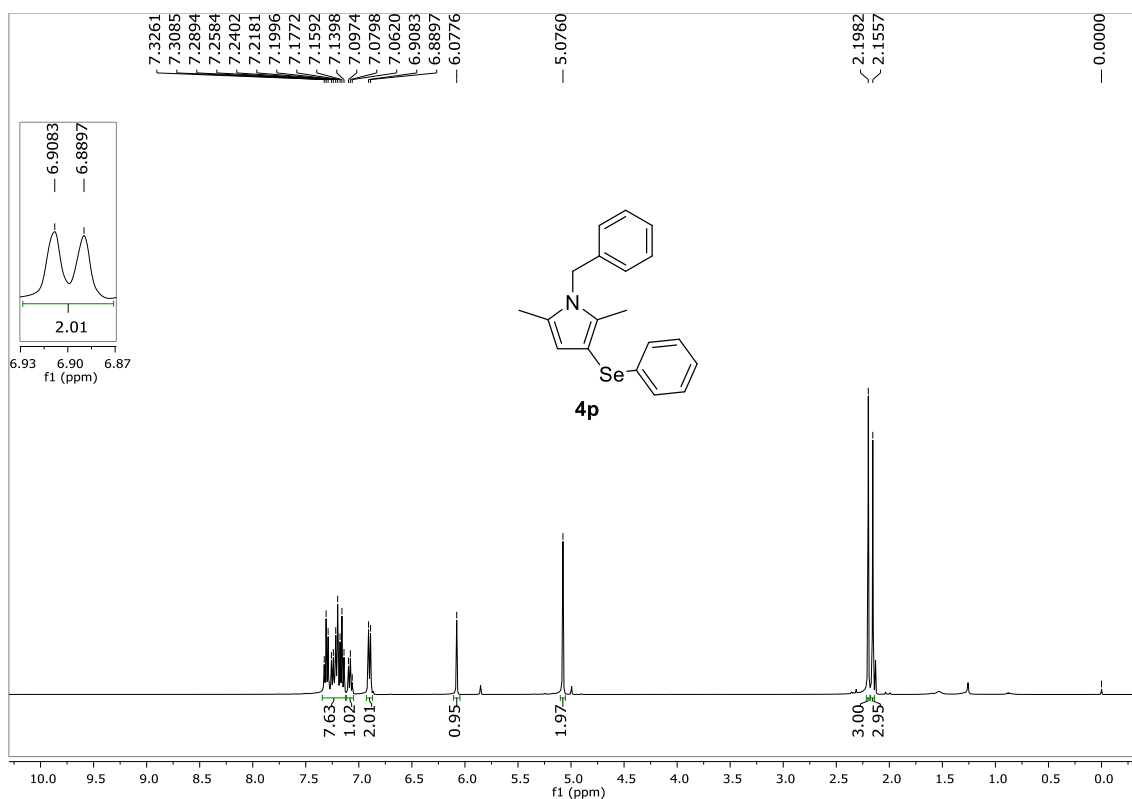


Figura 67. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **4p**.

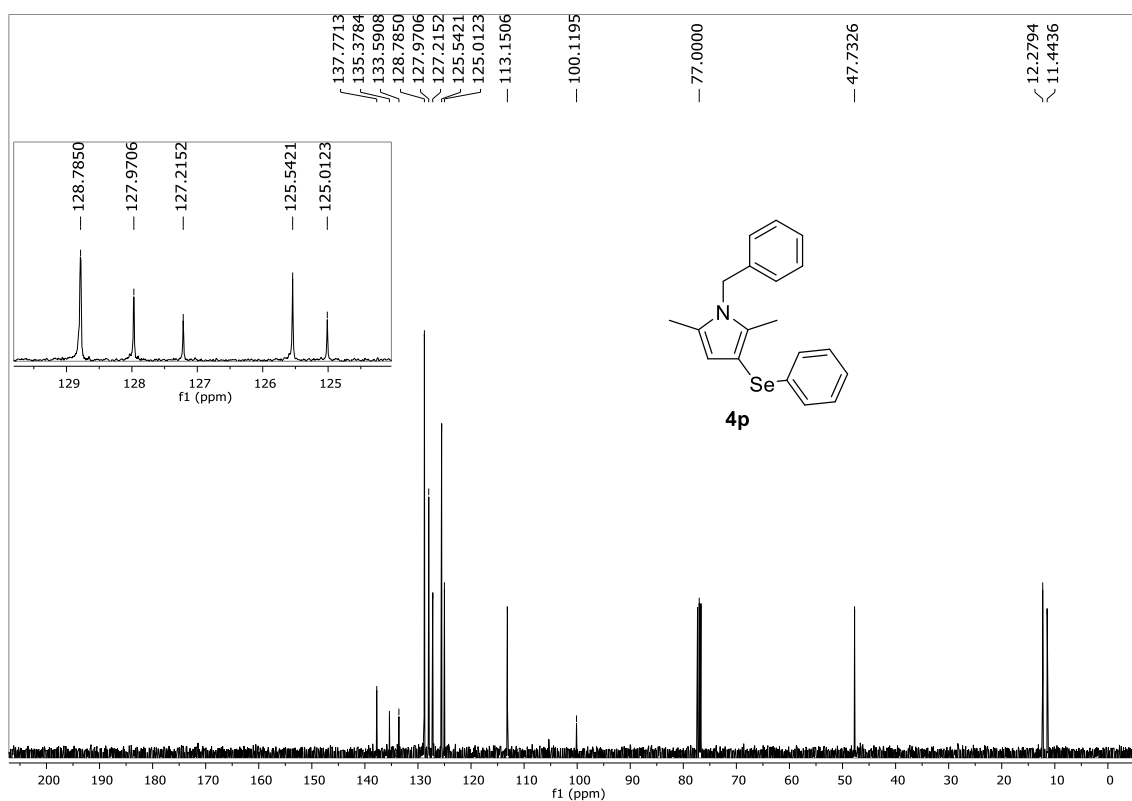


Figura 68. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **4p**.

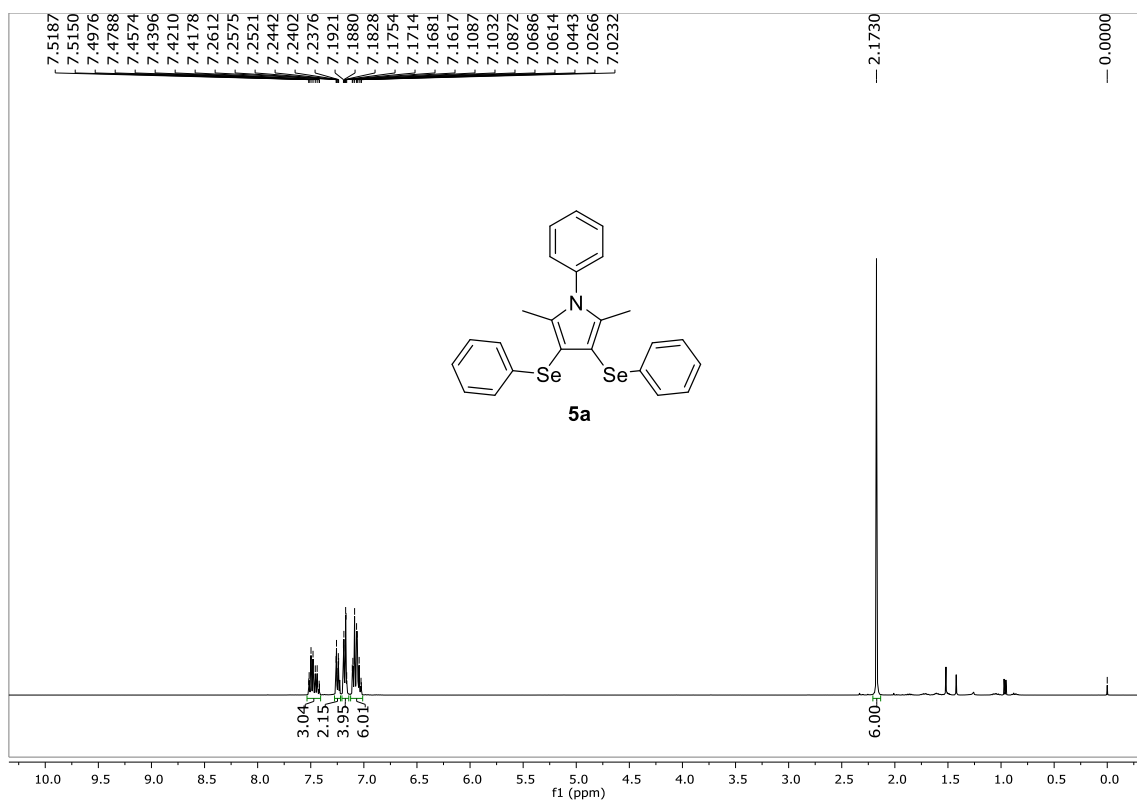


Figura 69. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 5a.

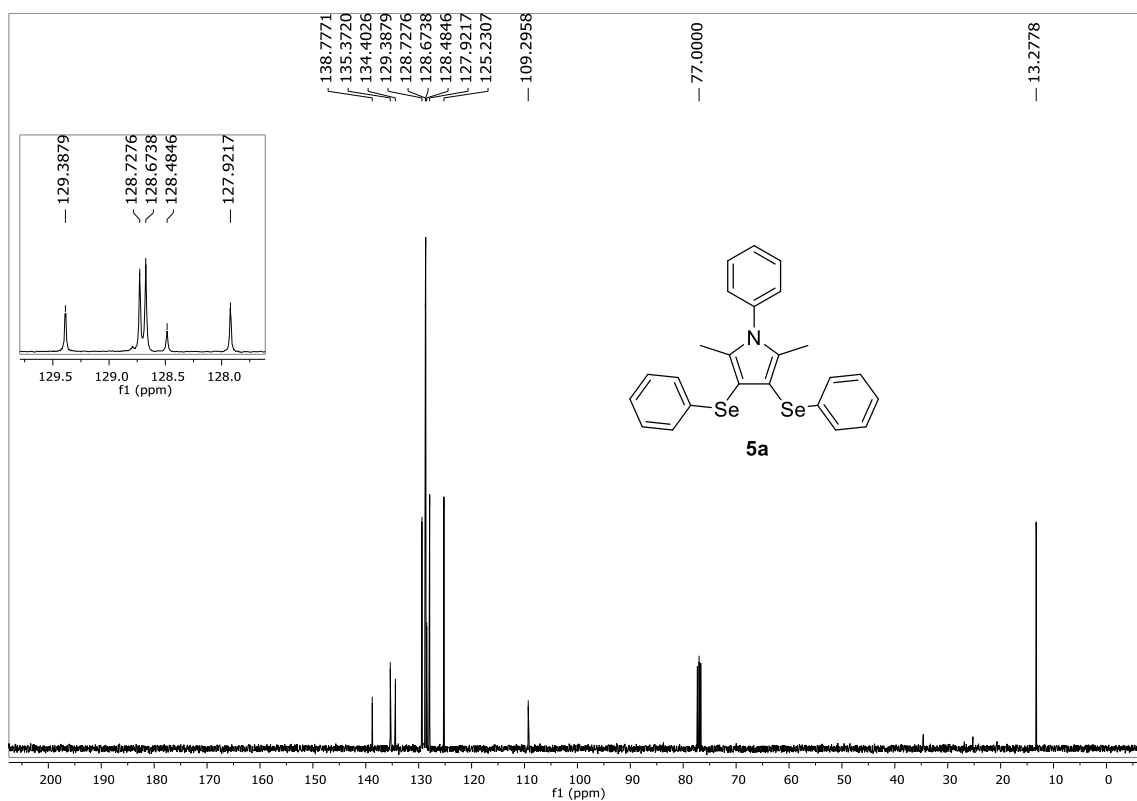


Figura 70. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 5a.

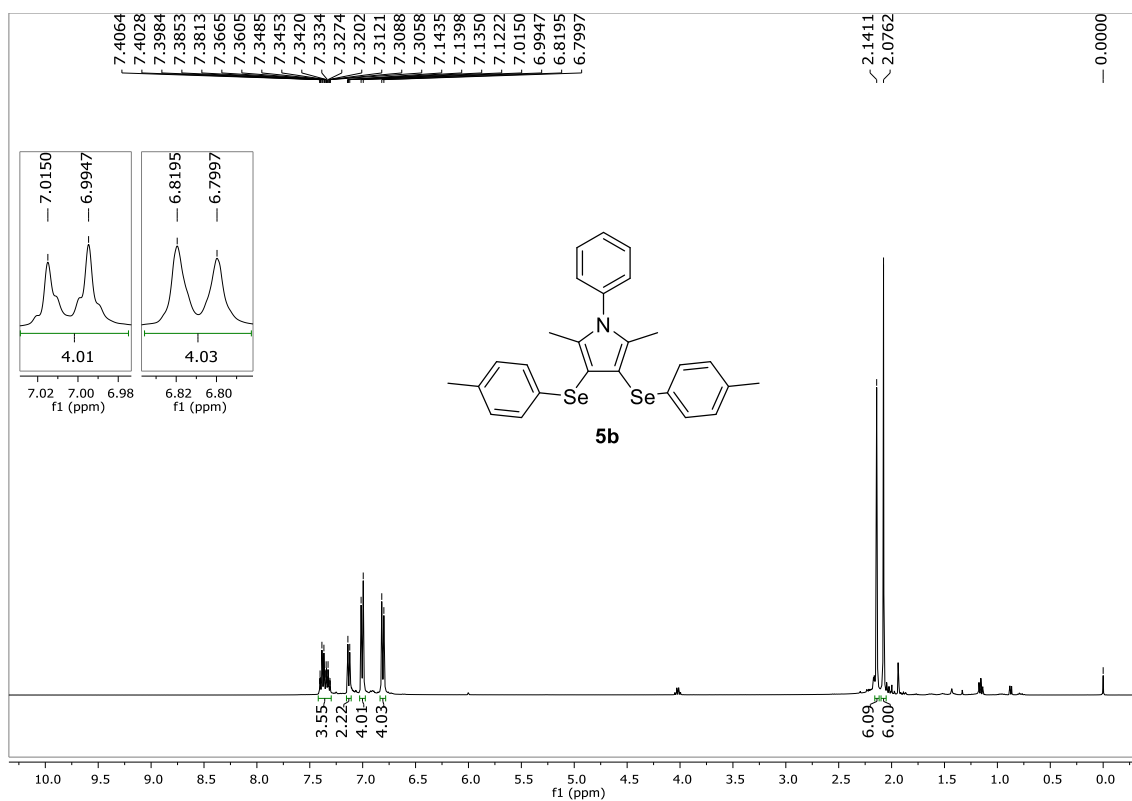


Figura 71. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **5b**.

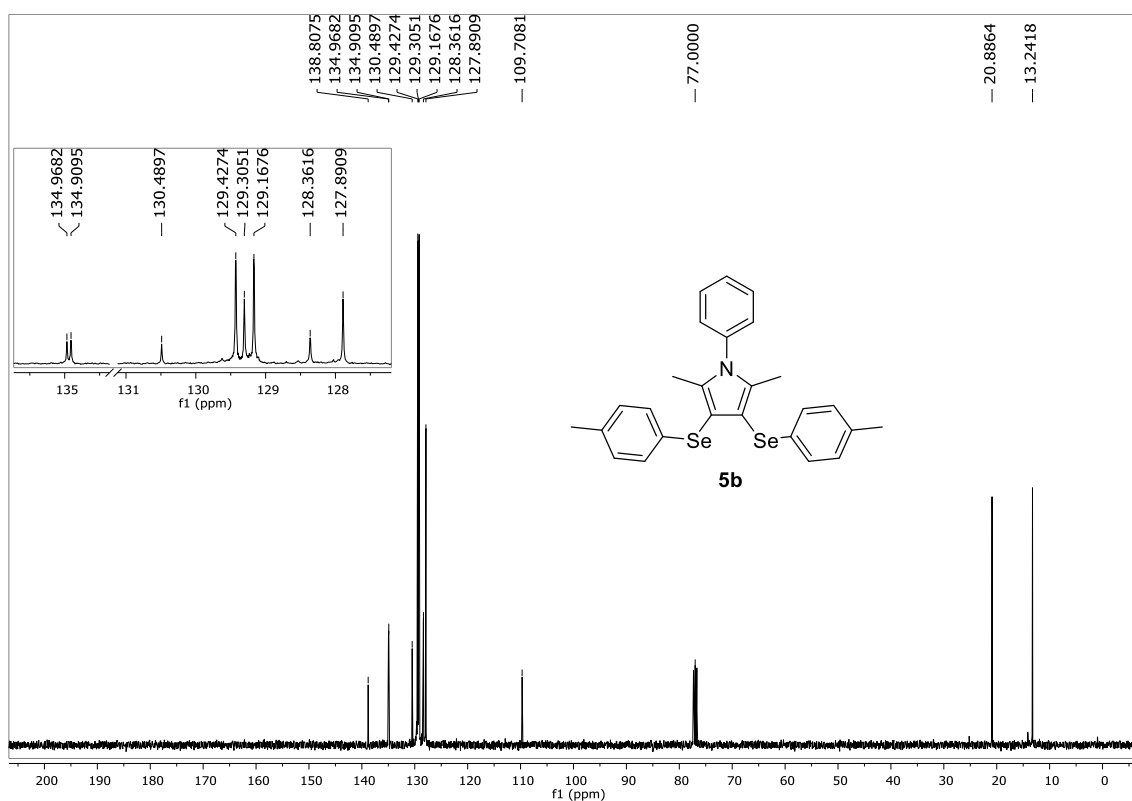


Figura 72. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **5b**.

6. Espectros Seleccionados

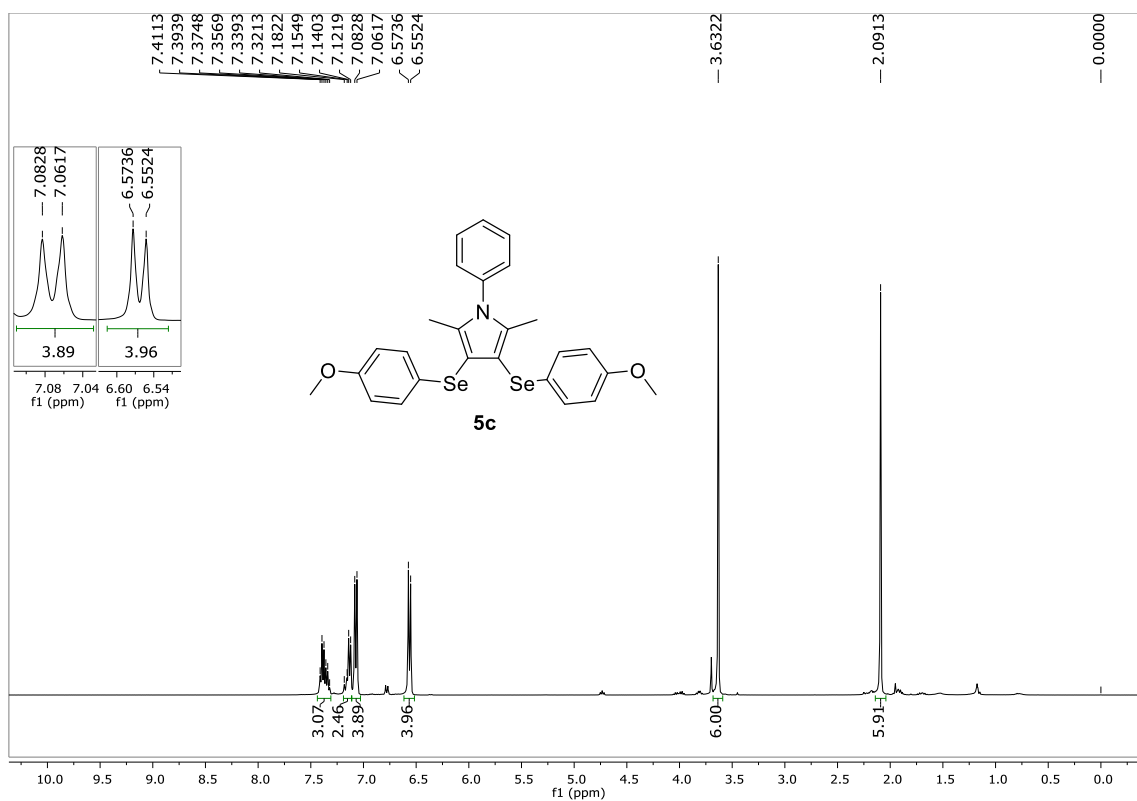


Figura 73. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **5c**.

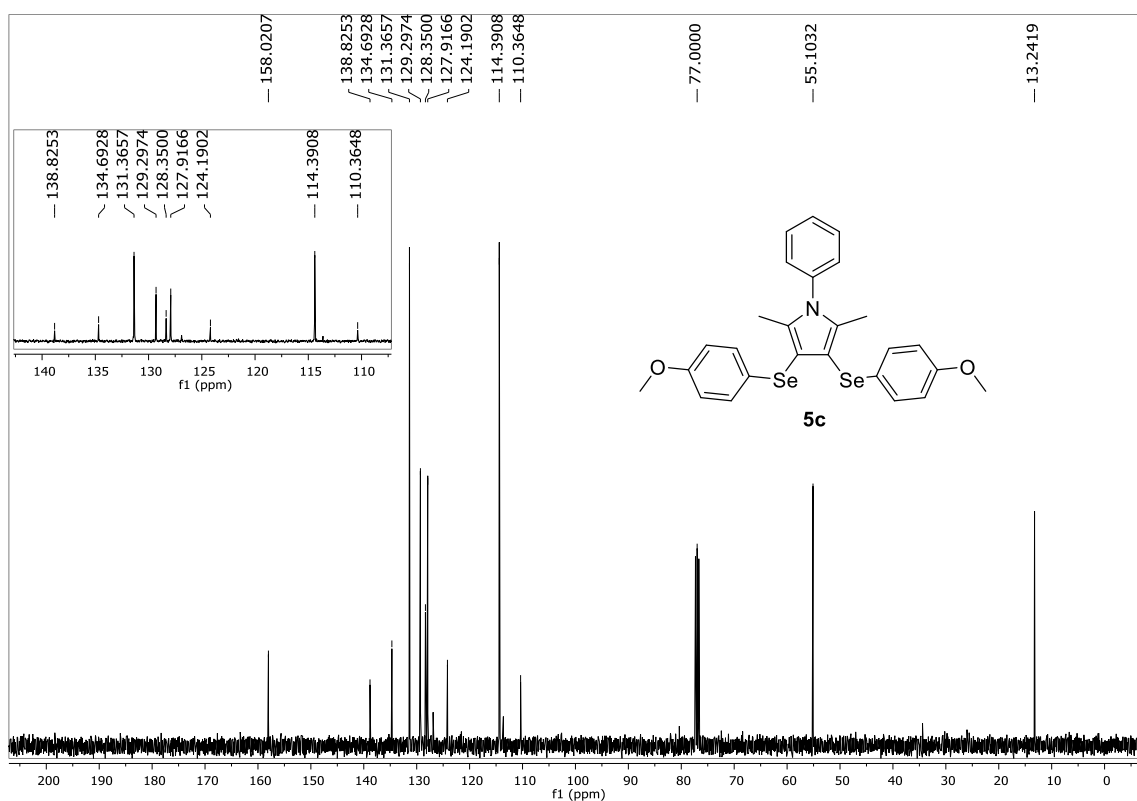


Figura 74. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **5c**.

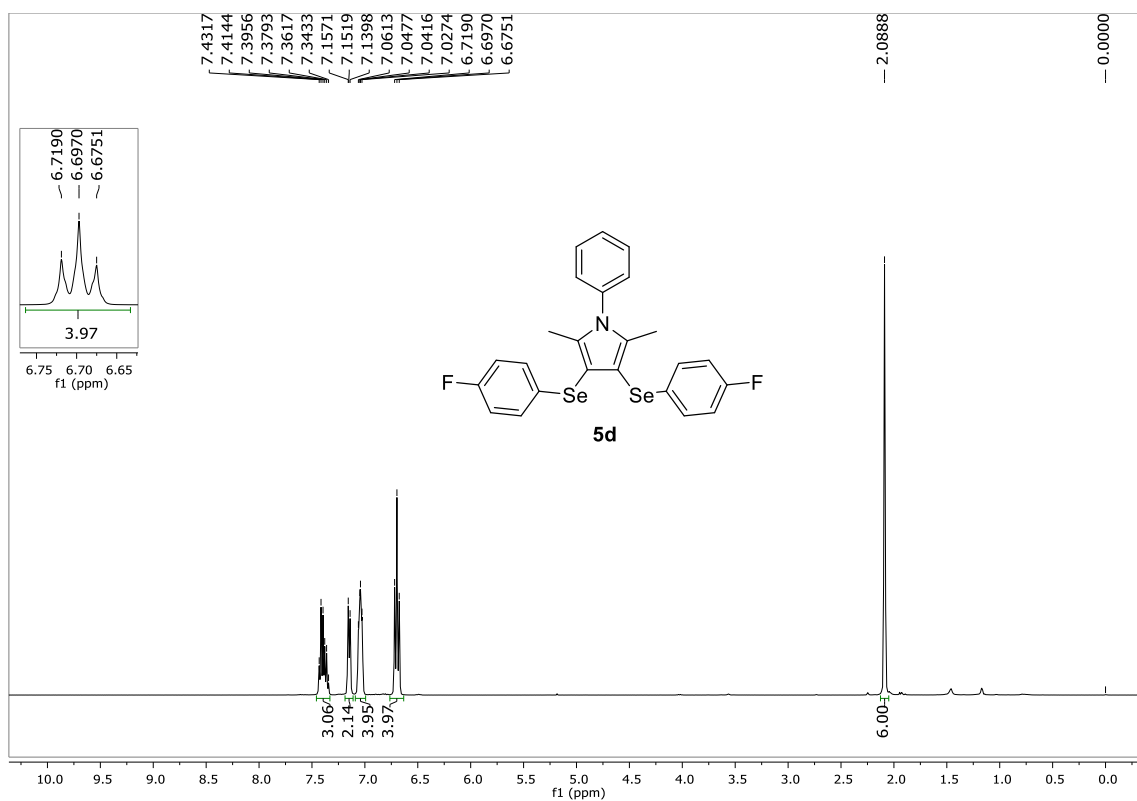


Figura 75. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **5d**.

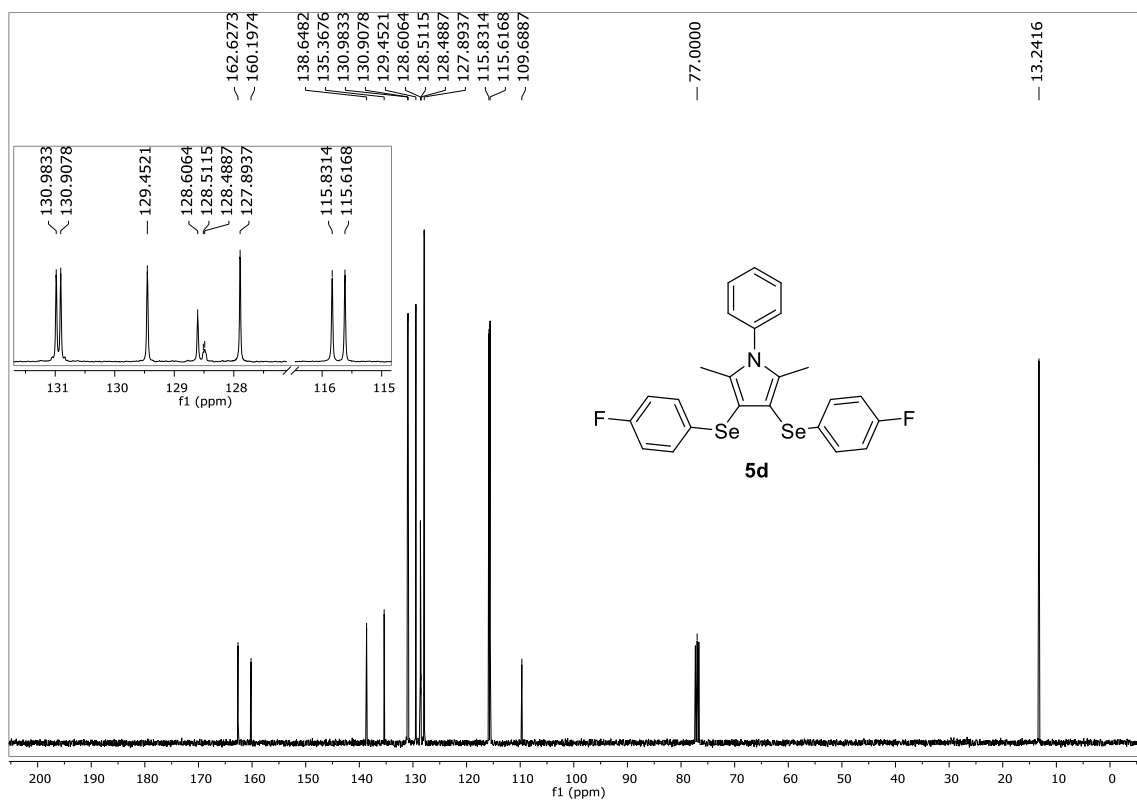


Figura 76. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **5d**.

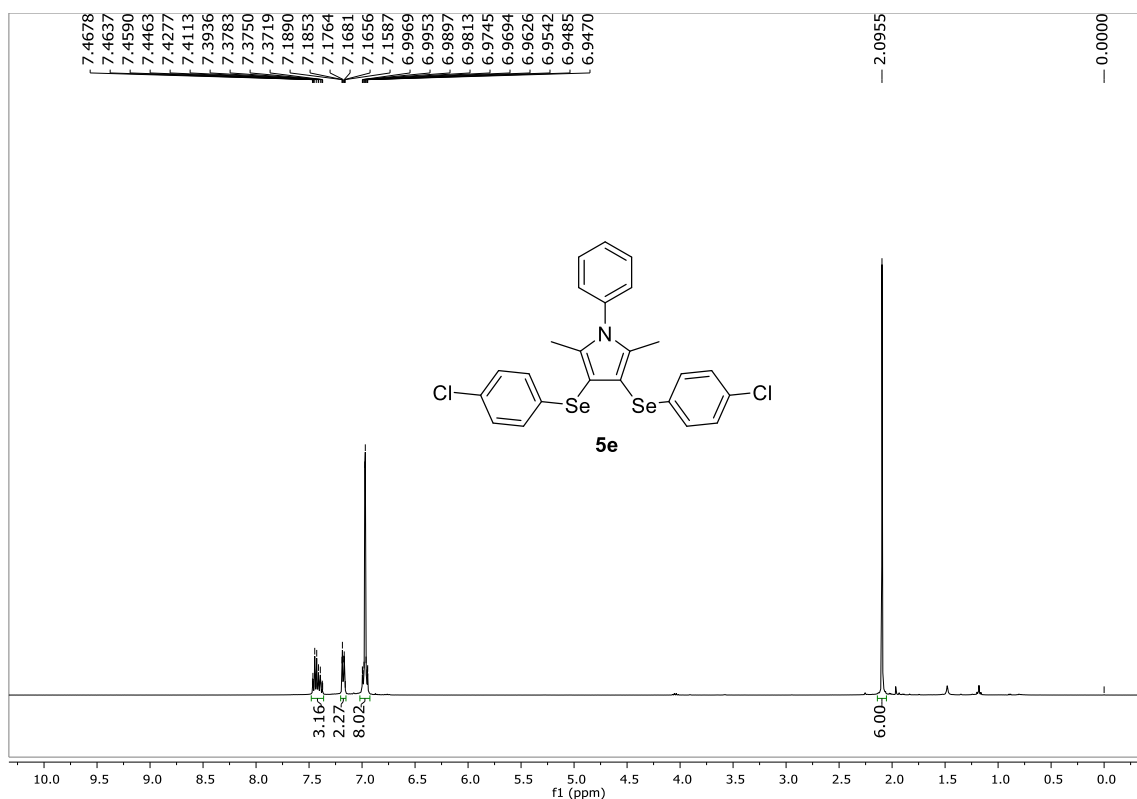


Figura 77. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **5e**.

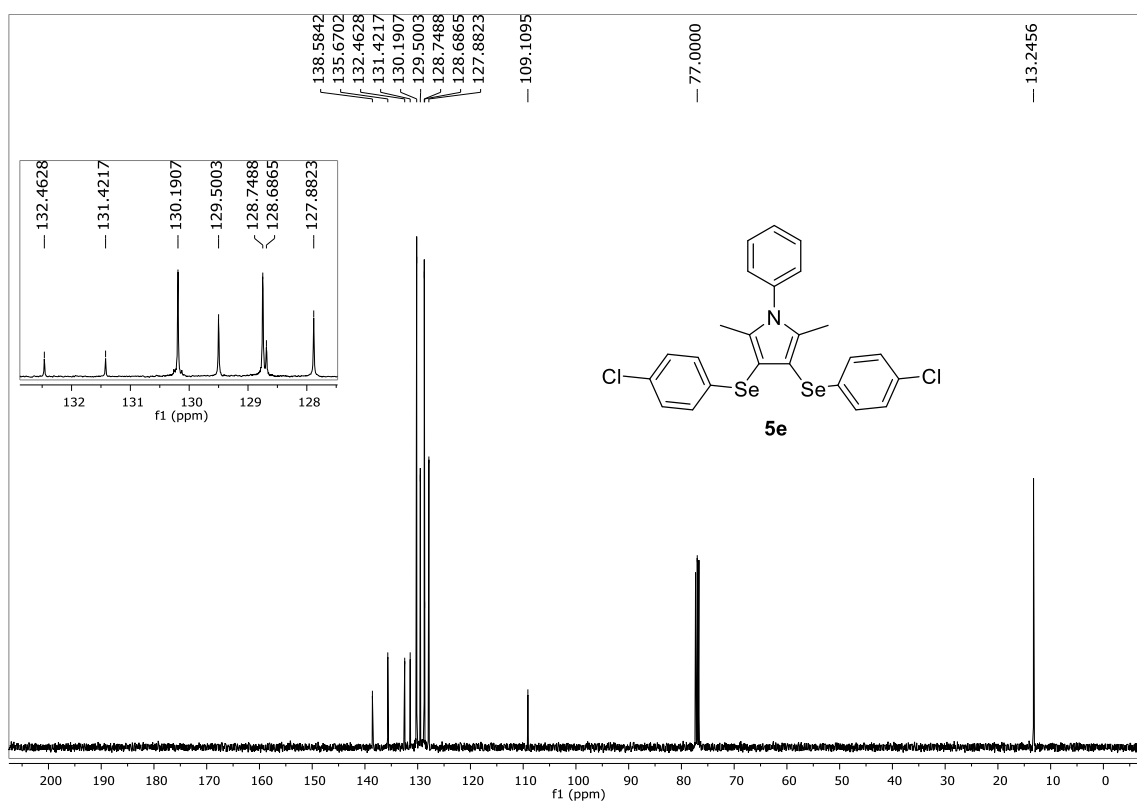


Figura 78. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **5e**.

6. Espectros Seleccionados

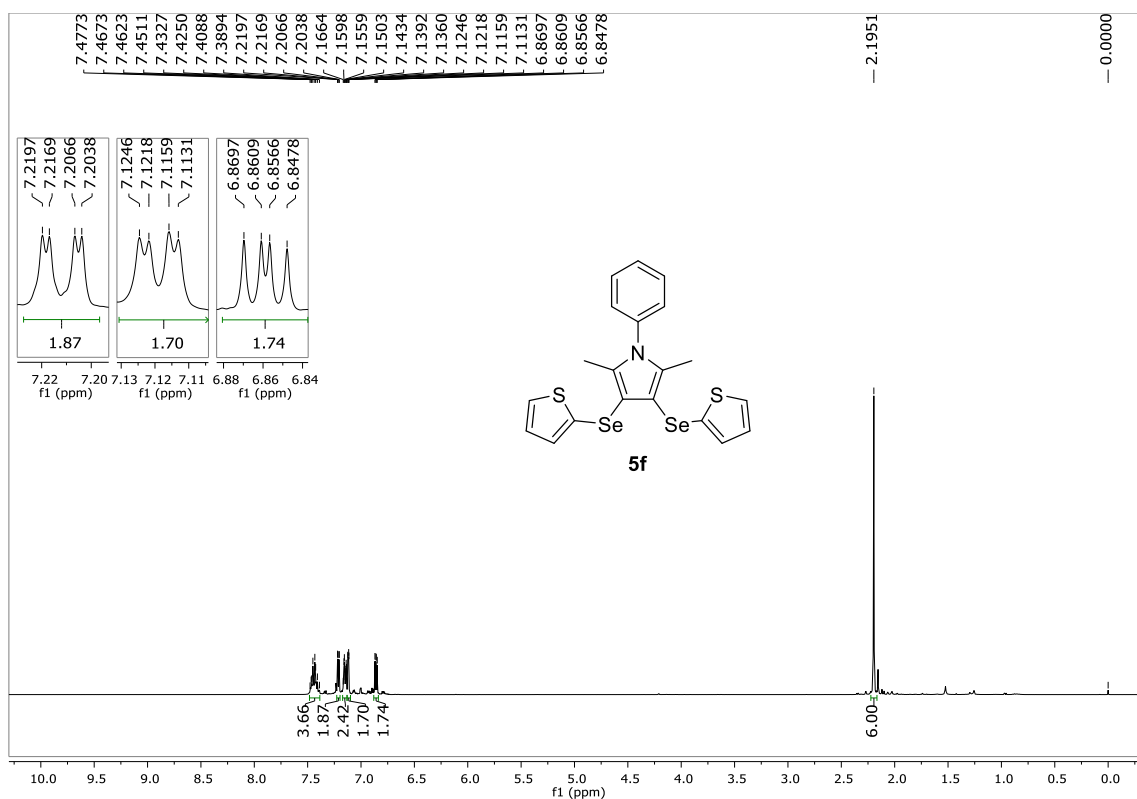


Figura 79. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **5f**.

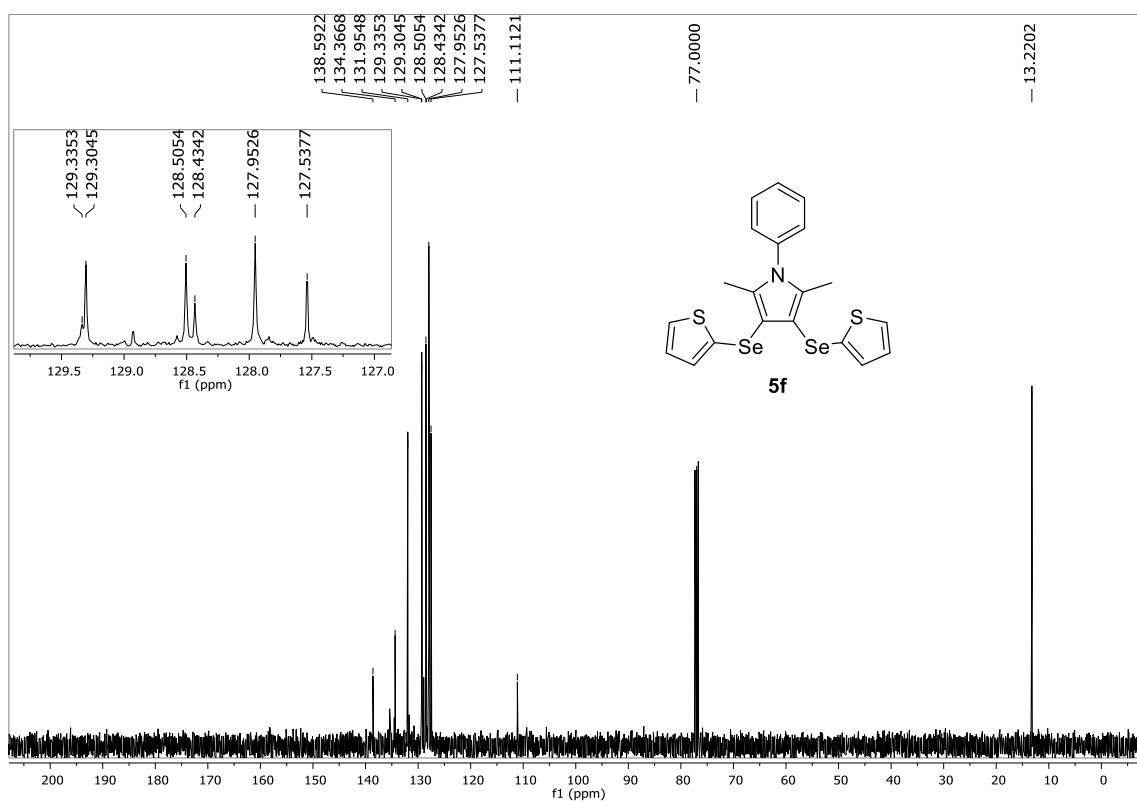


Figura 80. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **5f**.

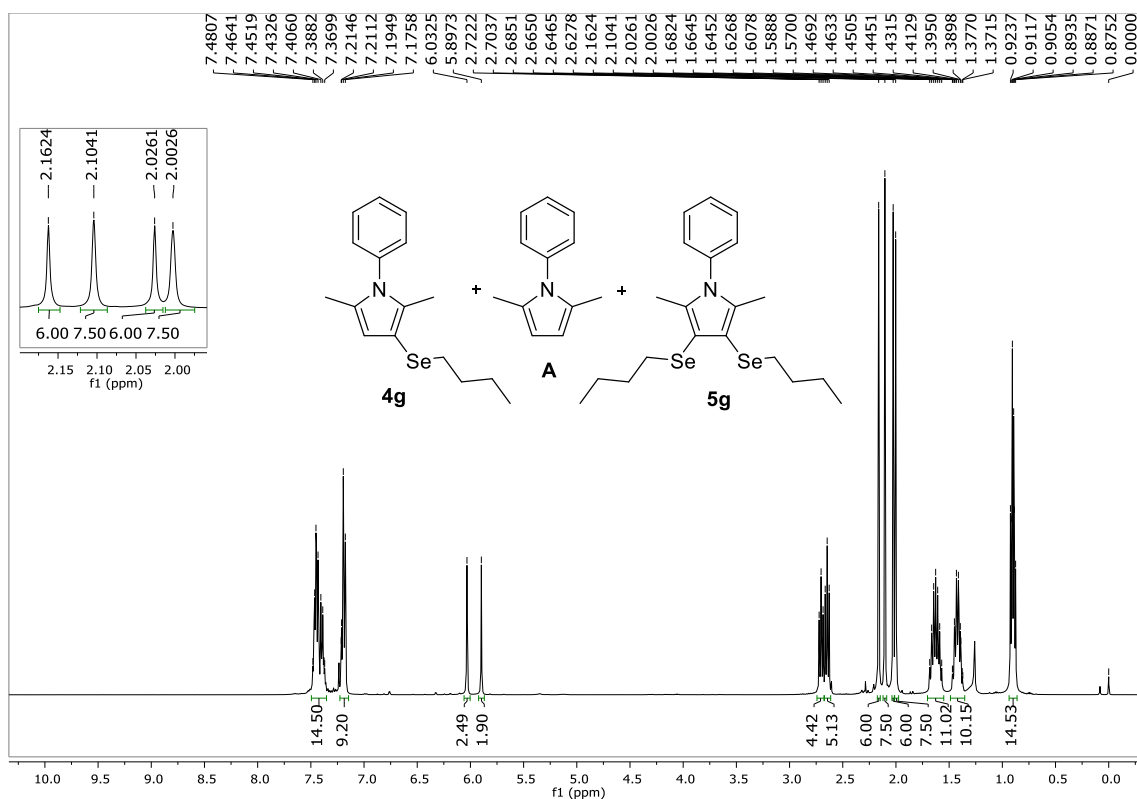


Figura 81. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 5g.

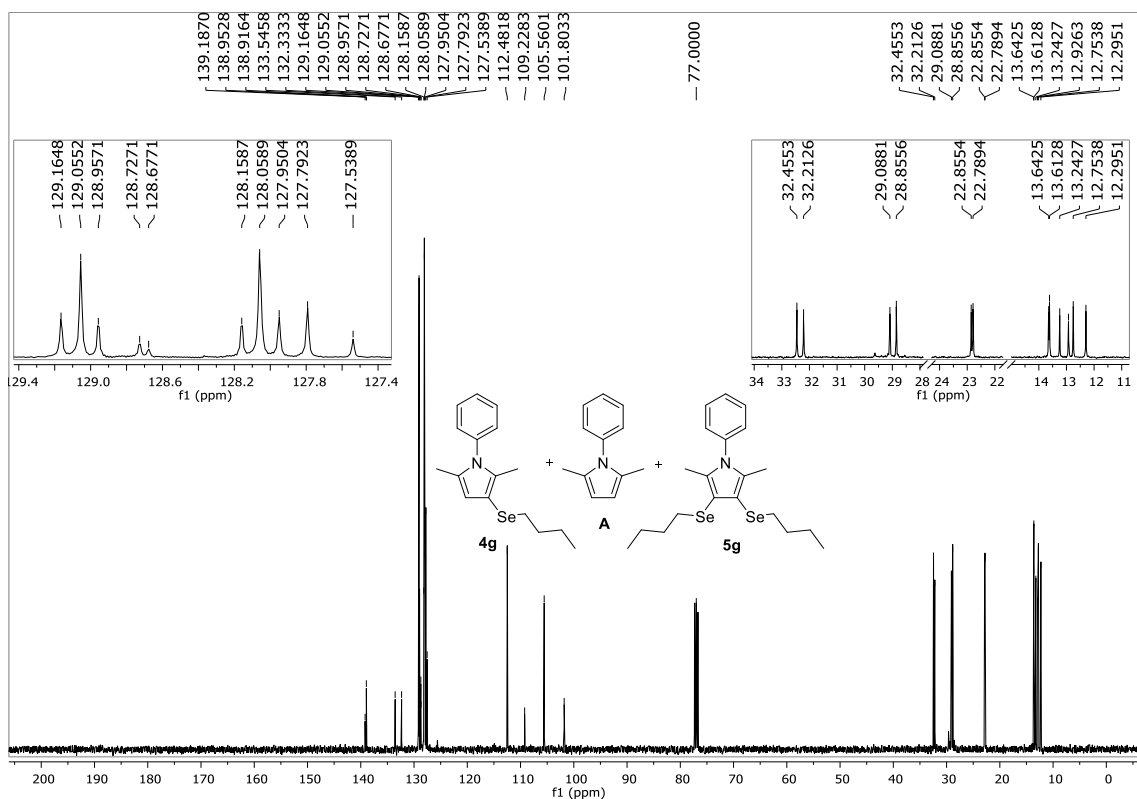


Figura 82. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 5g.

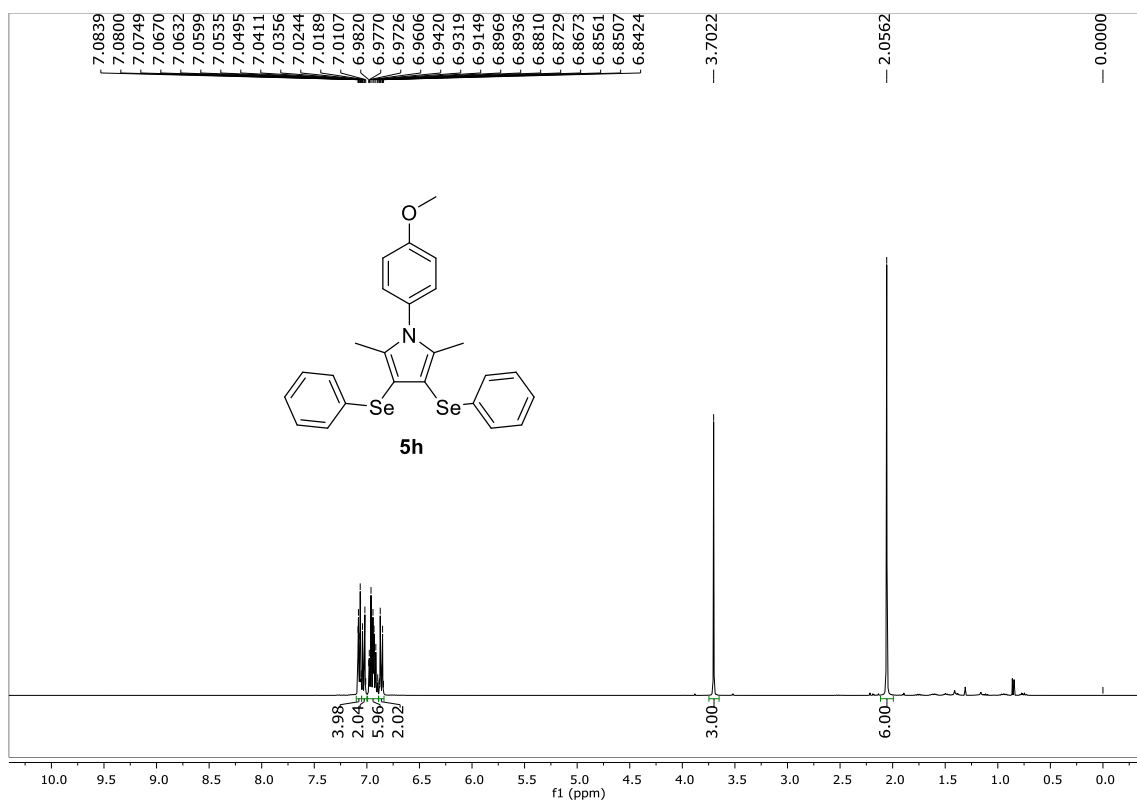


Figura 83. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **5h**.

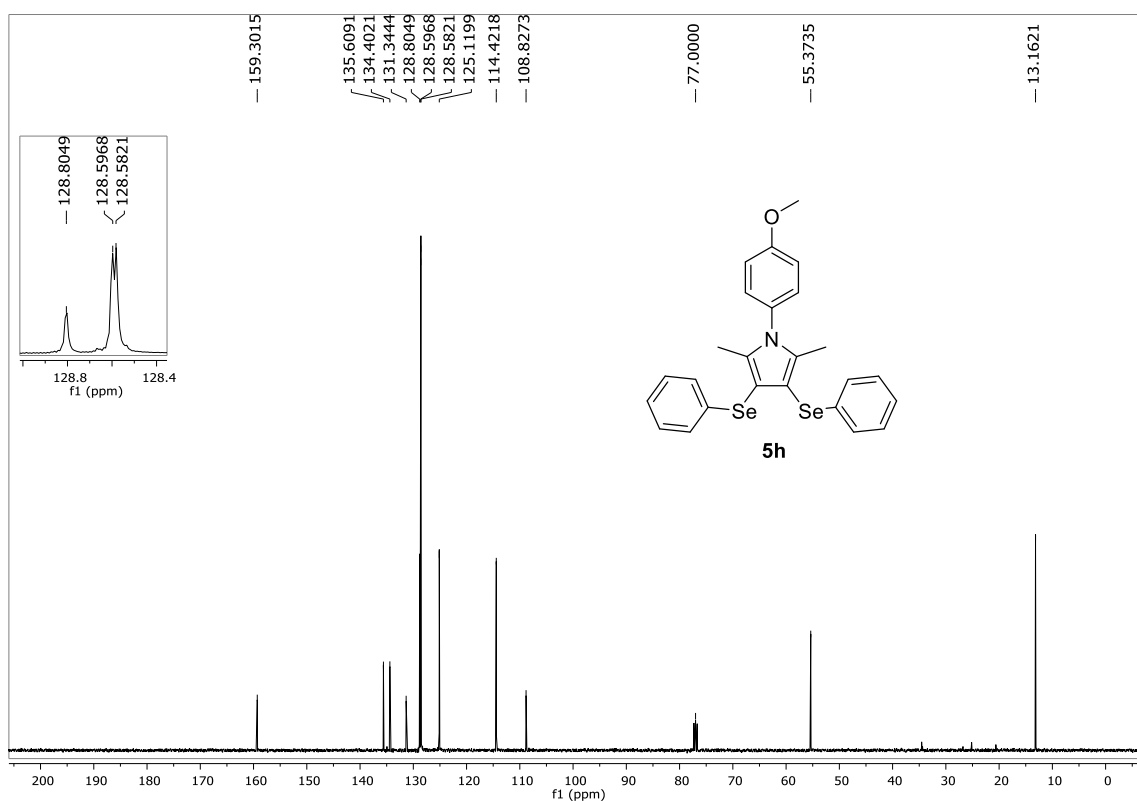


Figura 84. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **5h**.

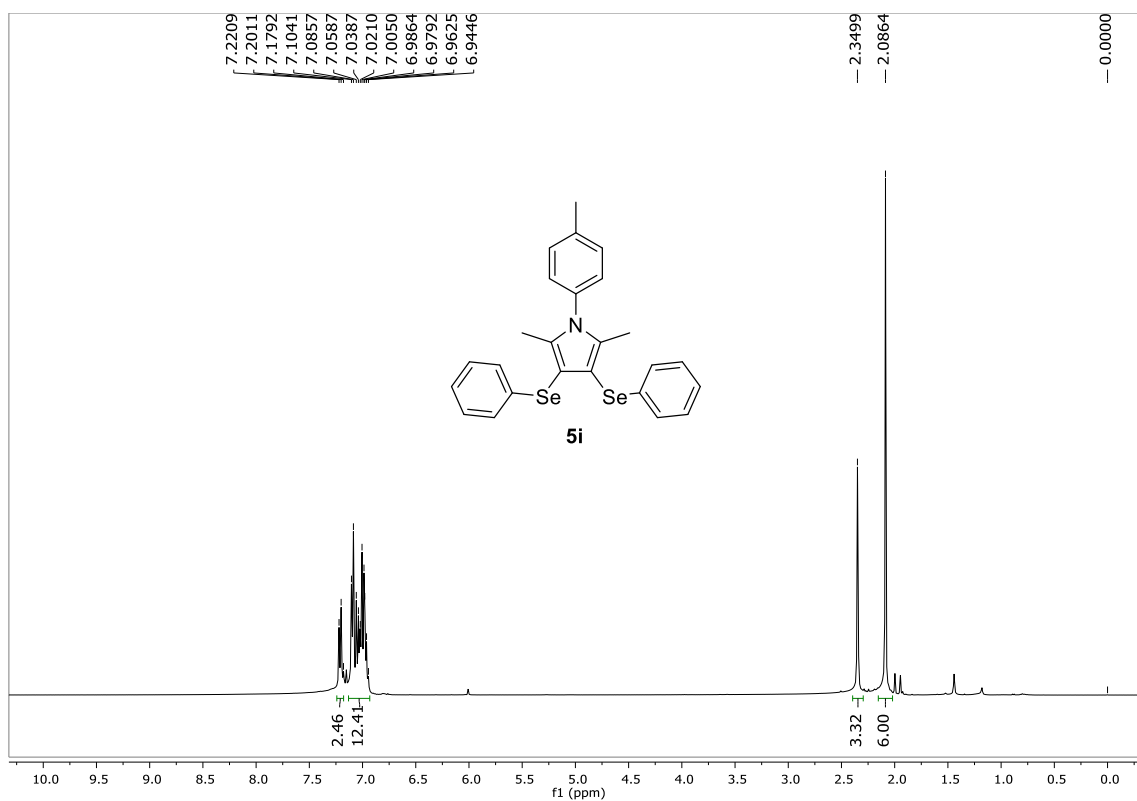


Figura 85. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **5i**.

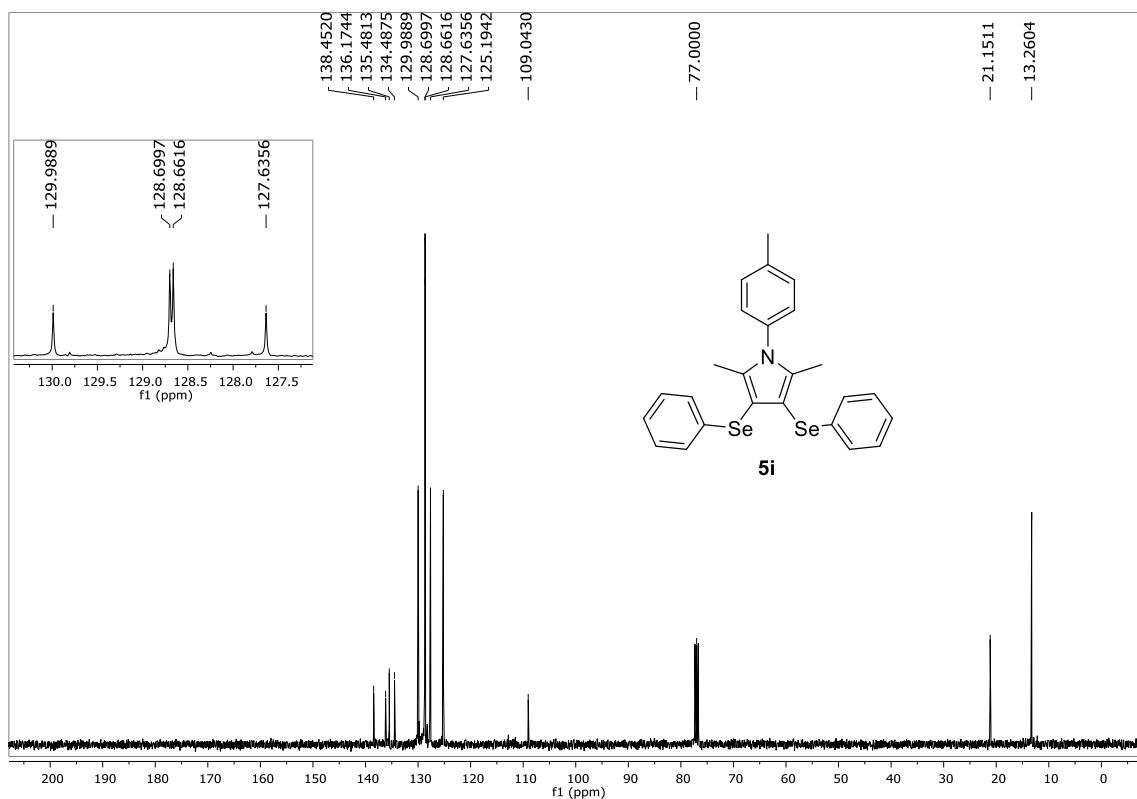


Figura 86. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **5i**.

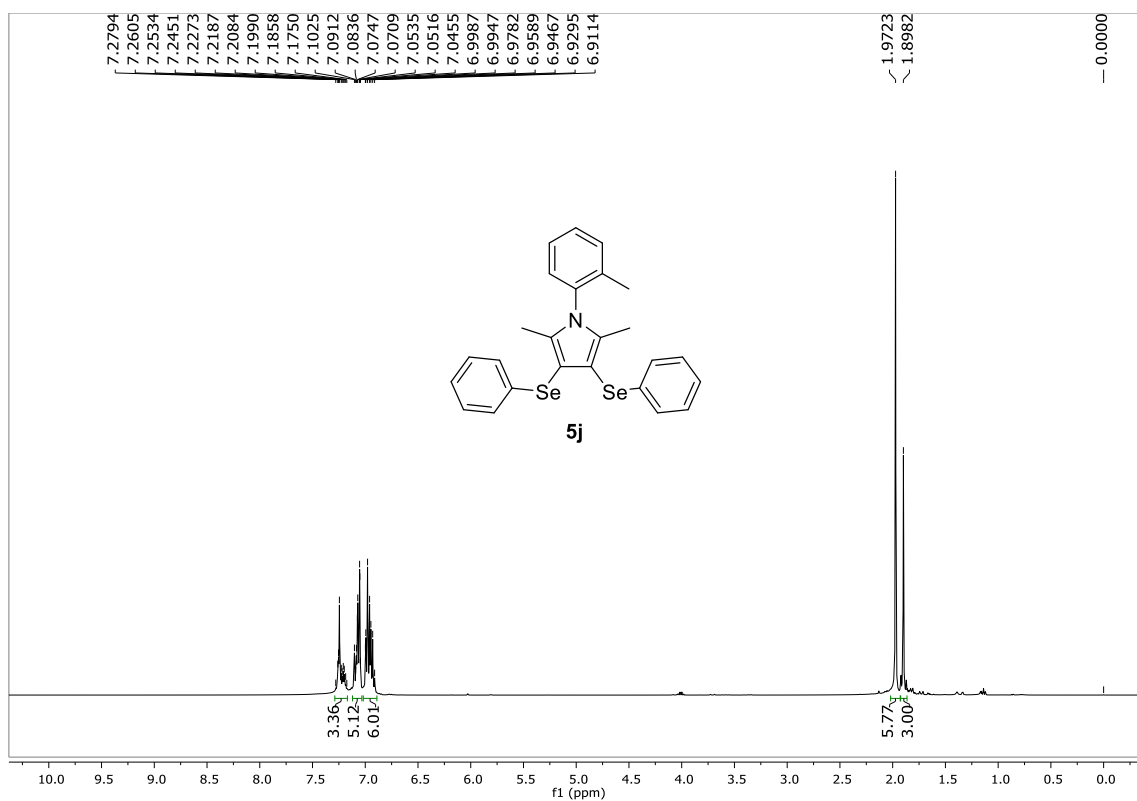


Figura 87. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **5j**.

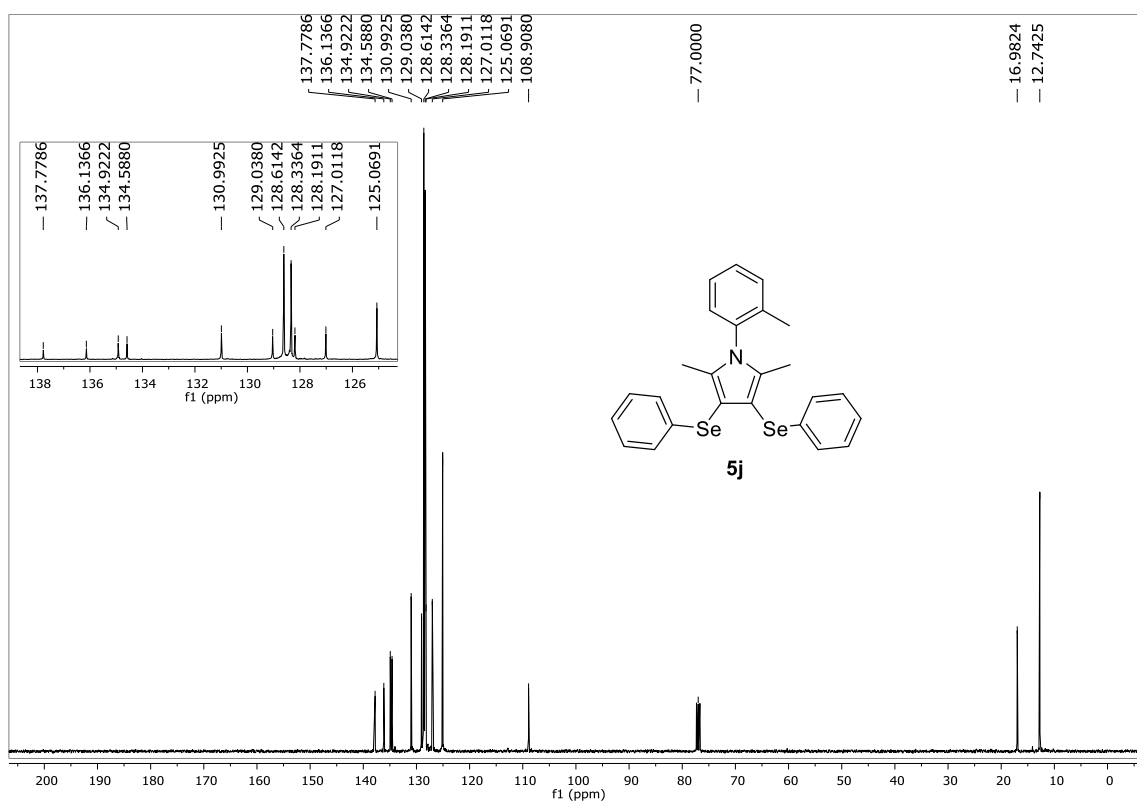


Figura 88. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **5j**.

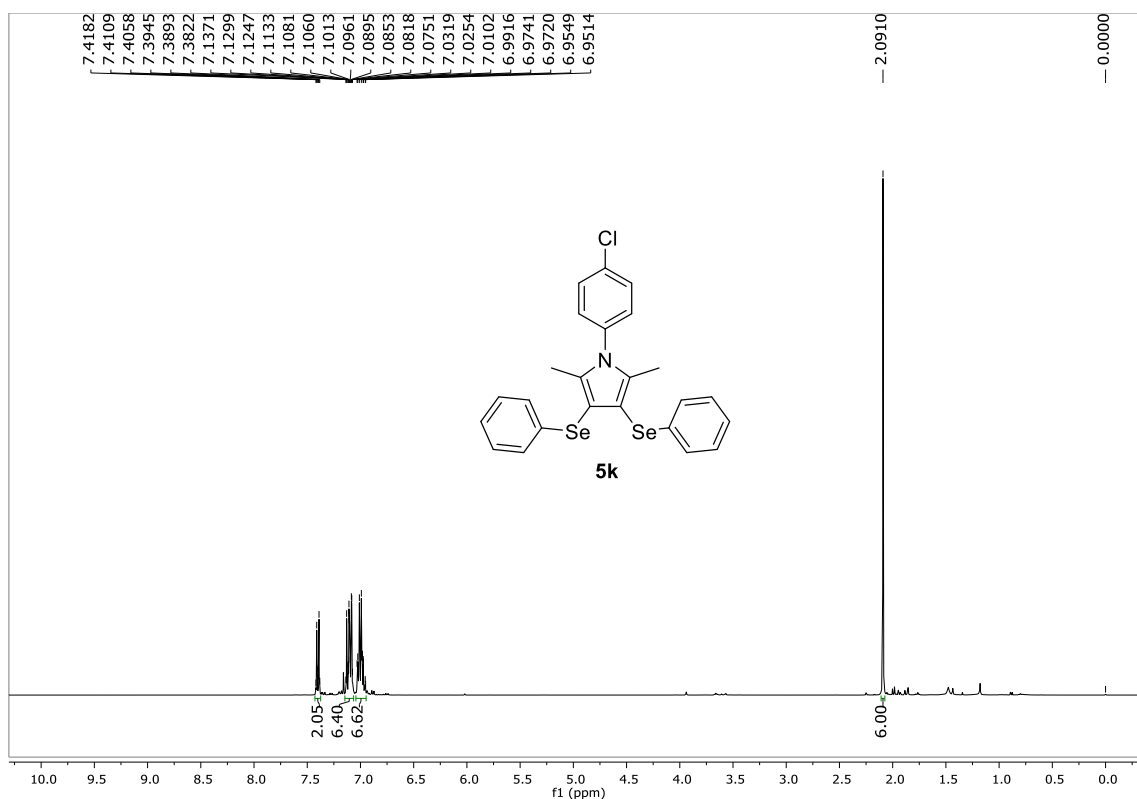


Figura 89. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **5k**.

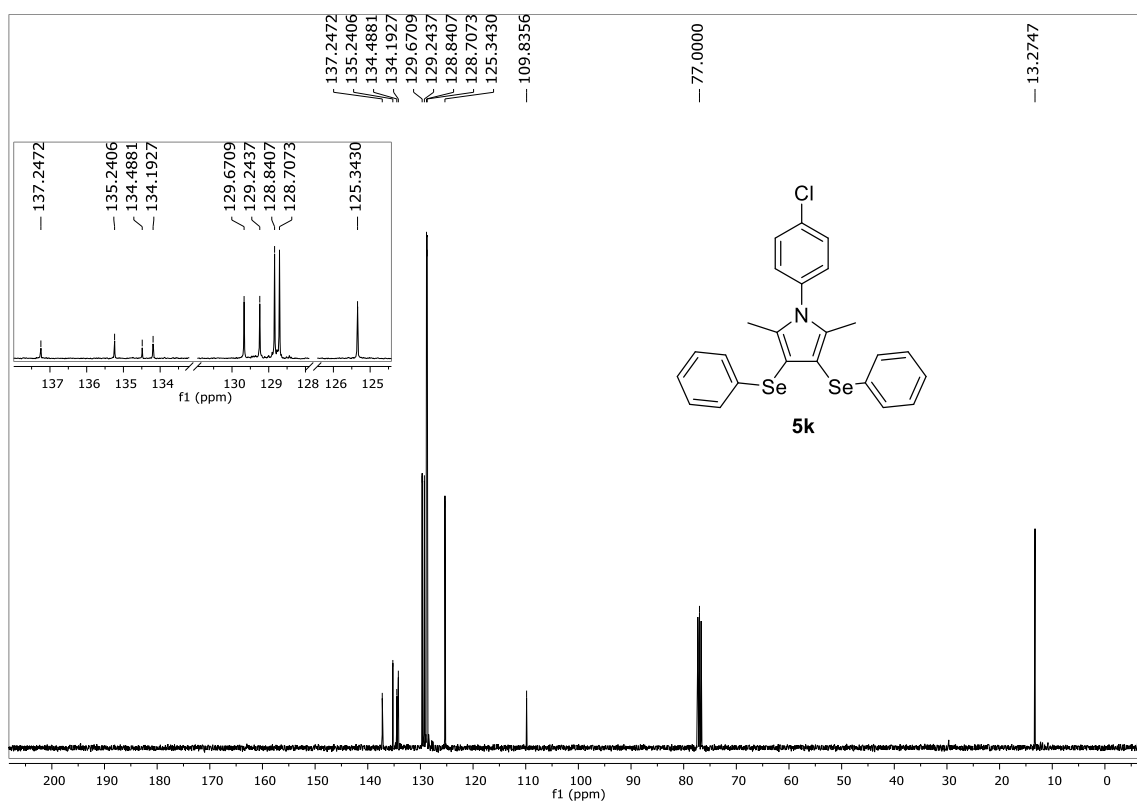


Figura 90. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **5k**.

6. Espectros Seleccionados

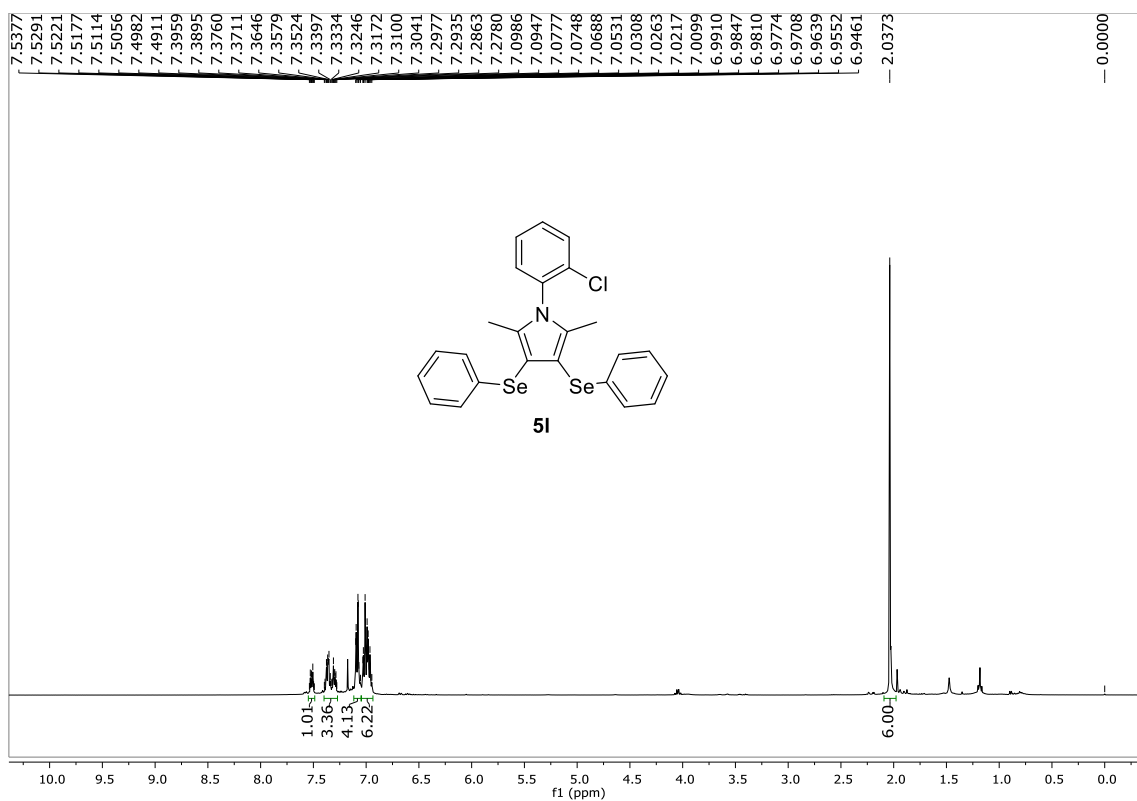


Figura 91. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **5I**.

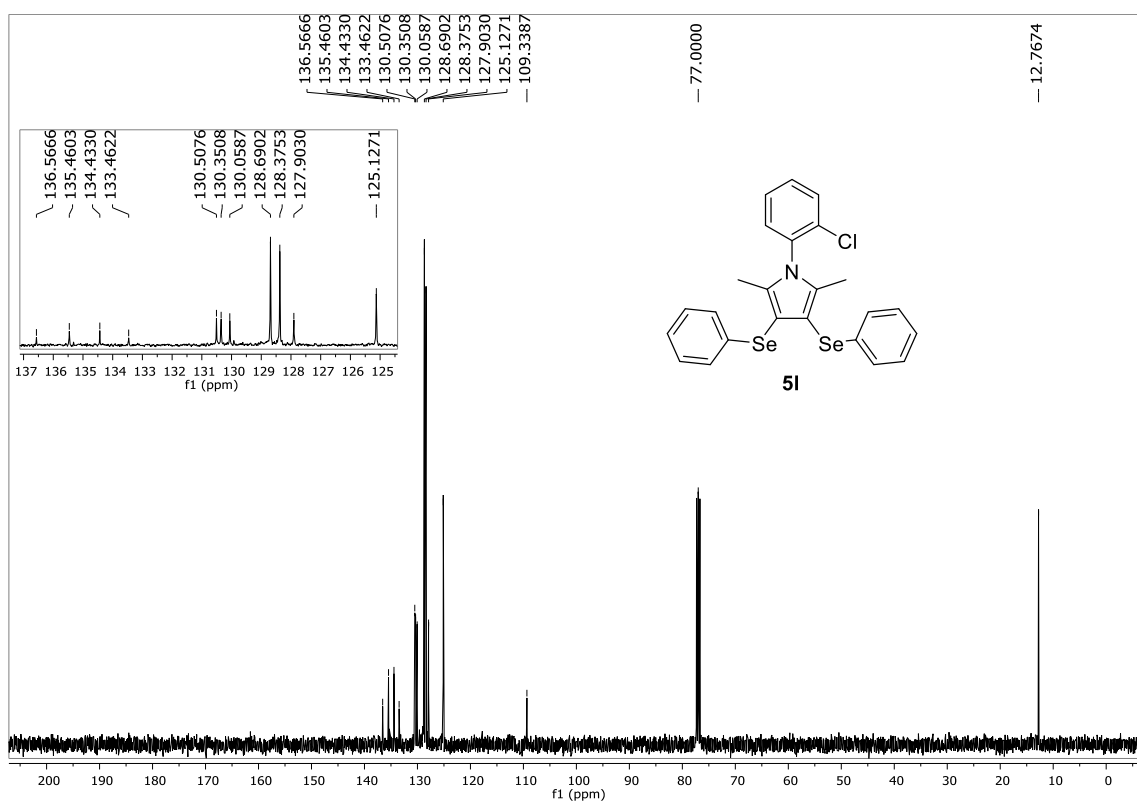


Figura 92. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **5I**.

6. Espectros Seleccionados

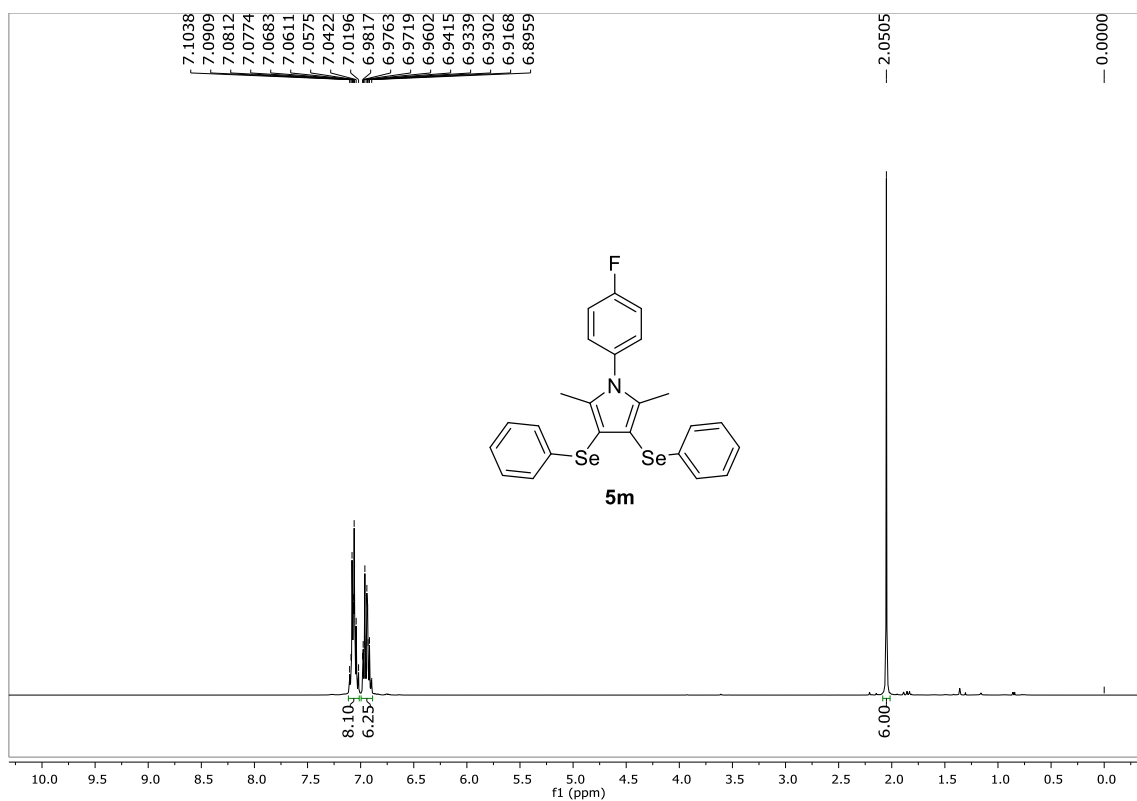


Figura 93. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **5m**.

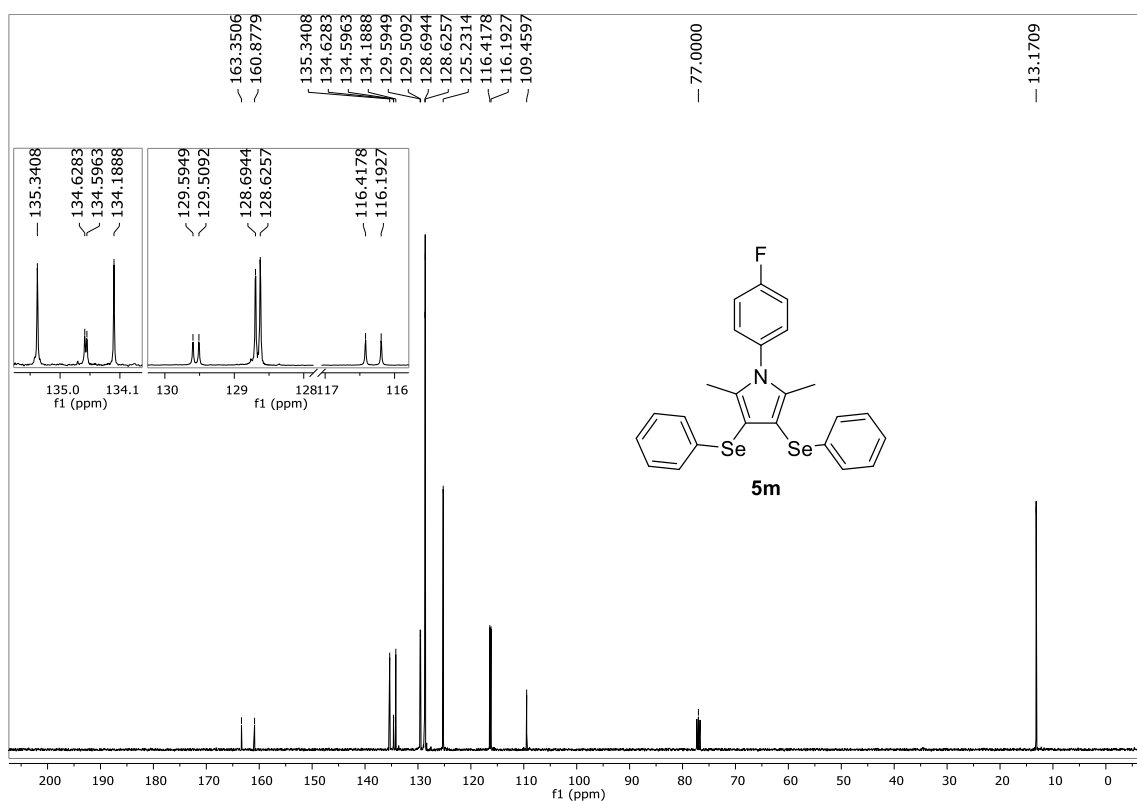


Figura 94. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **5m**.

6. Espectros Seleccionados

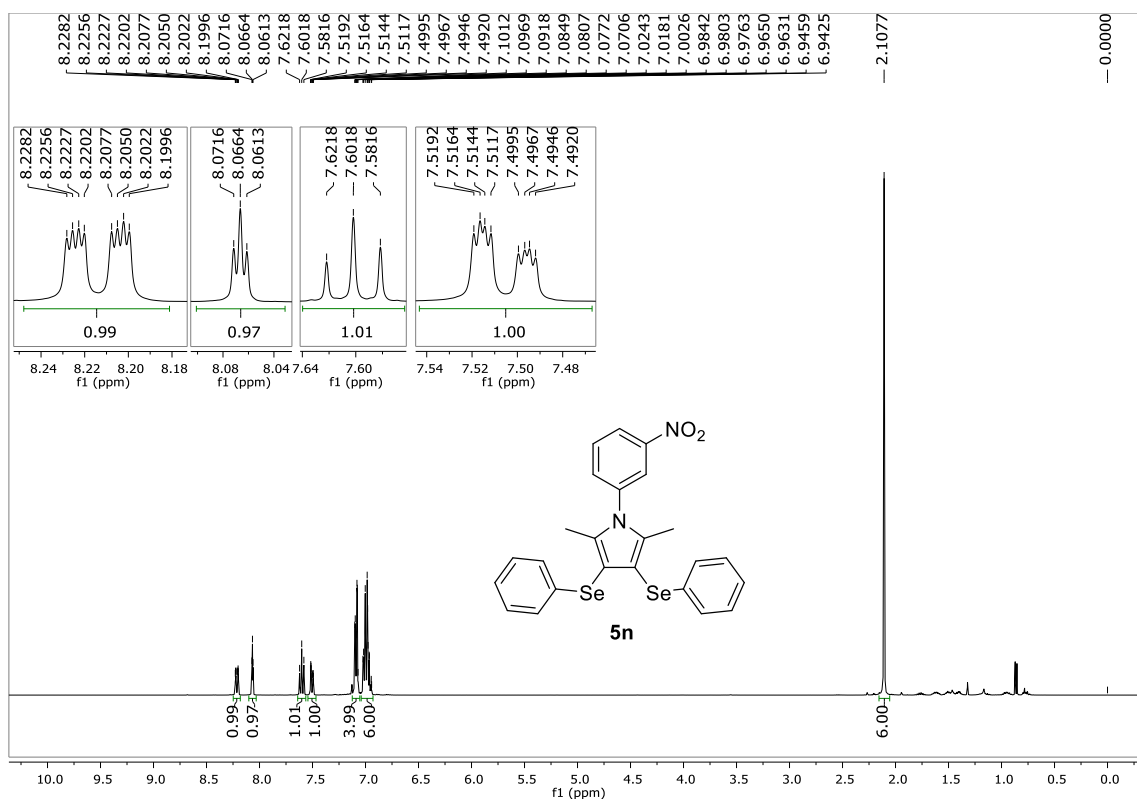


Figura 95. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **5n**.

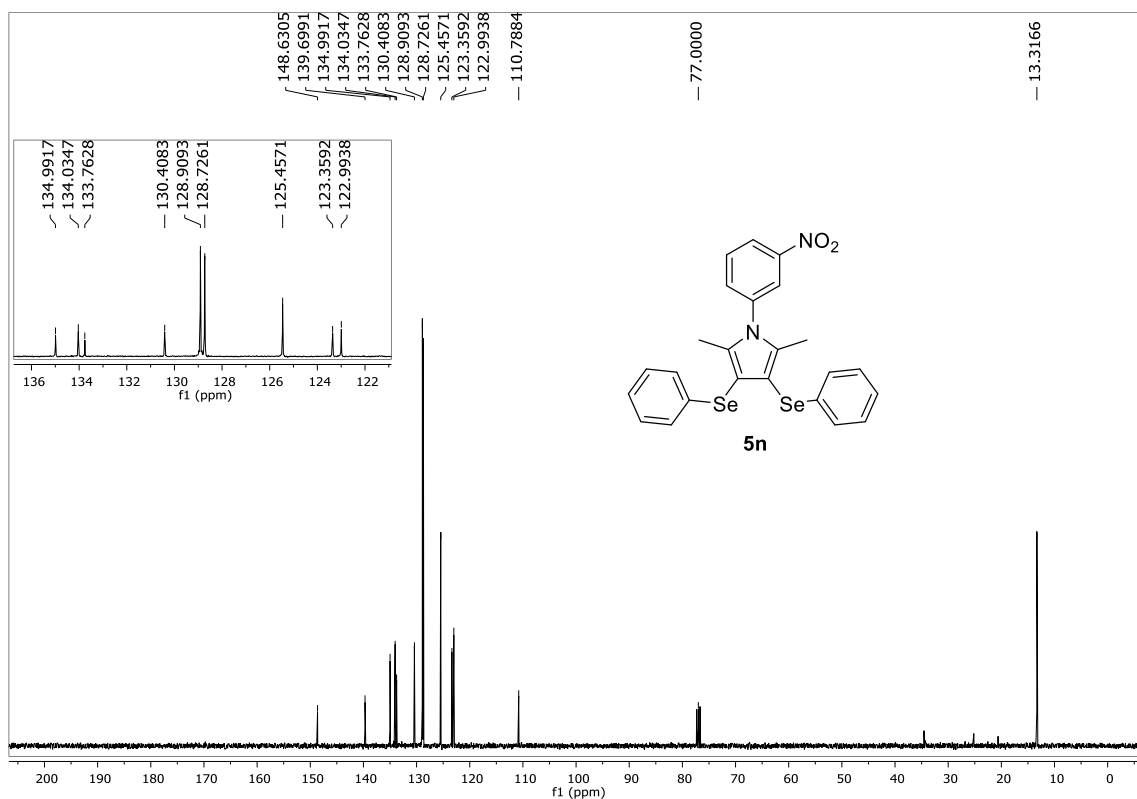


Figura 96. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **5n**.

6. Espectros Seleccionados

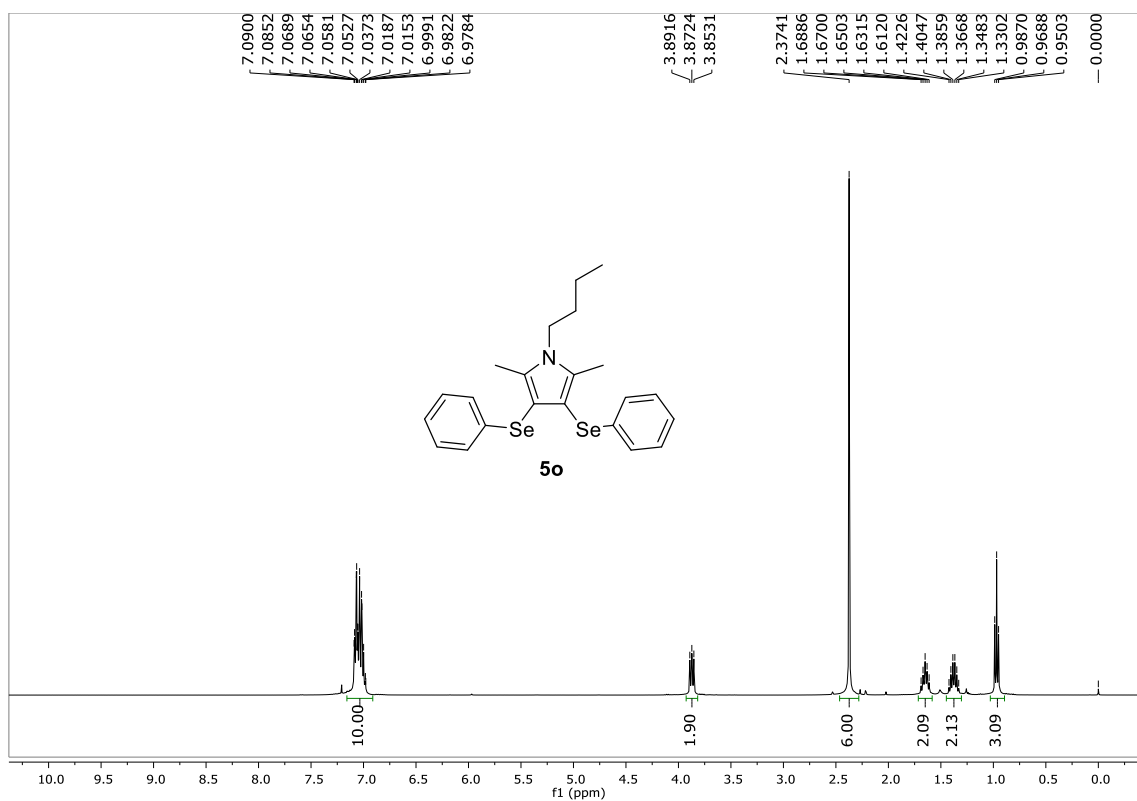


Figura 97. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **5o**.

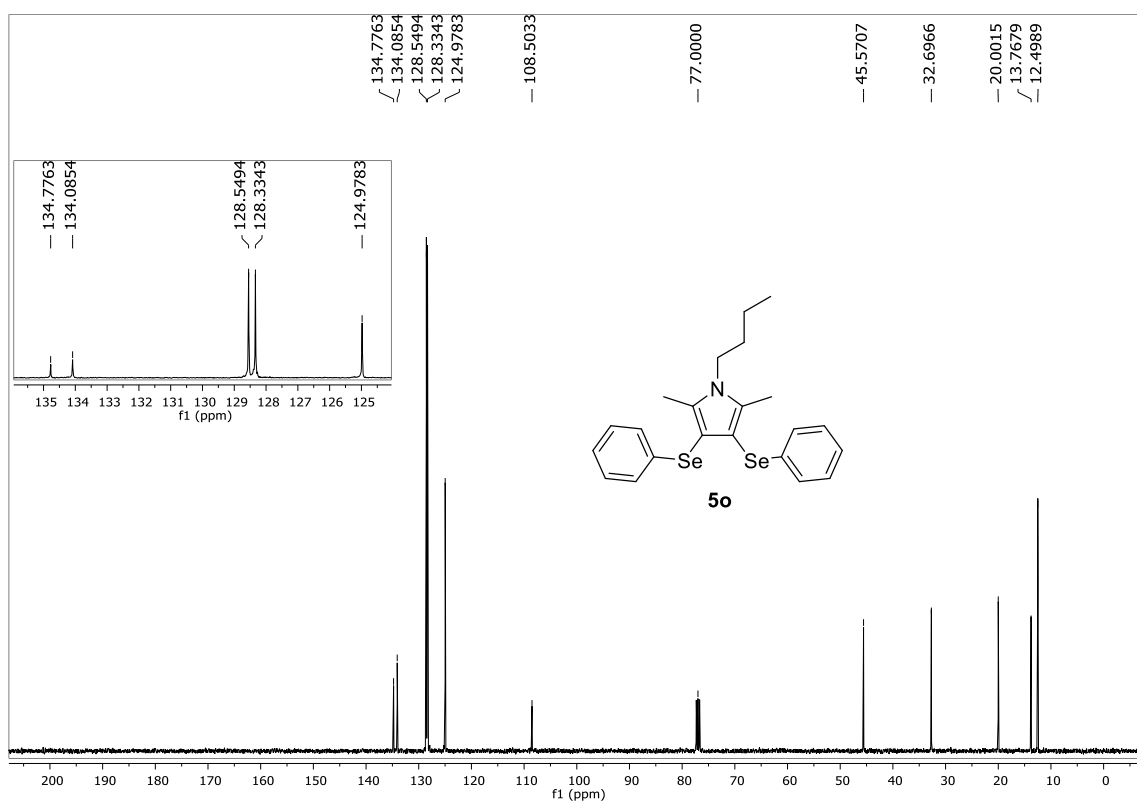


Figura 98. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **5o**.

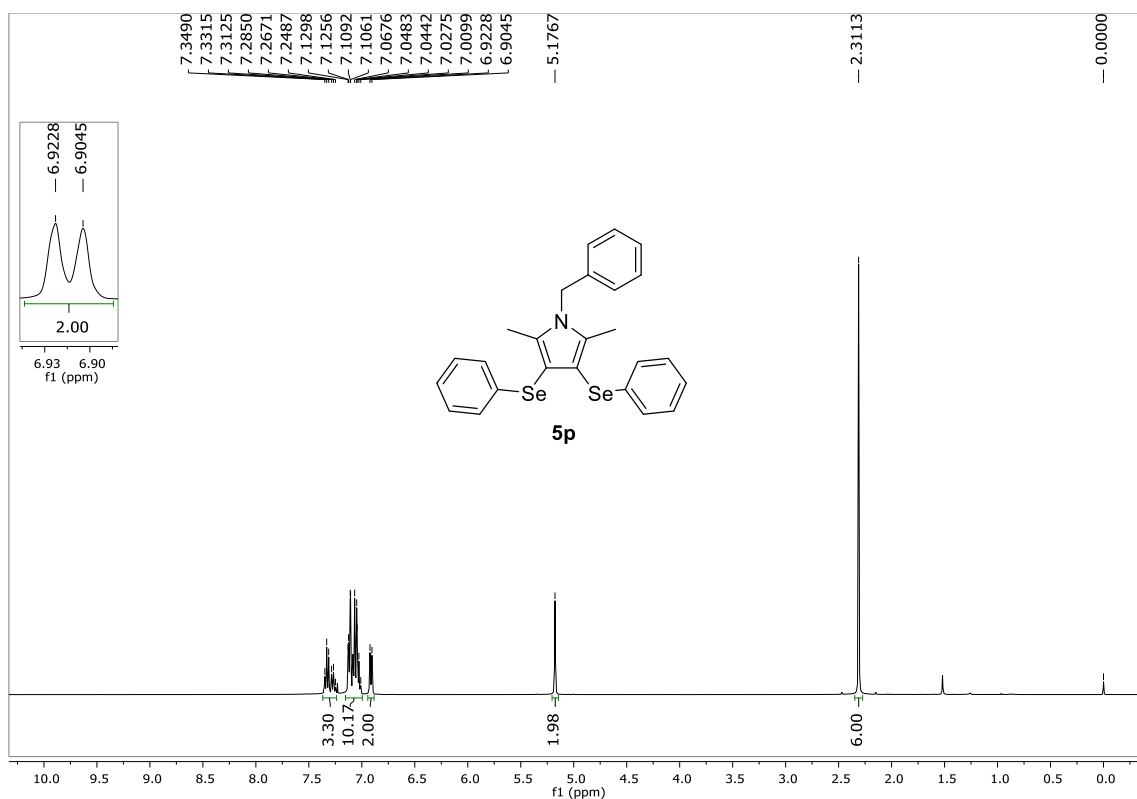


Figura 99. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 5p.

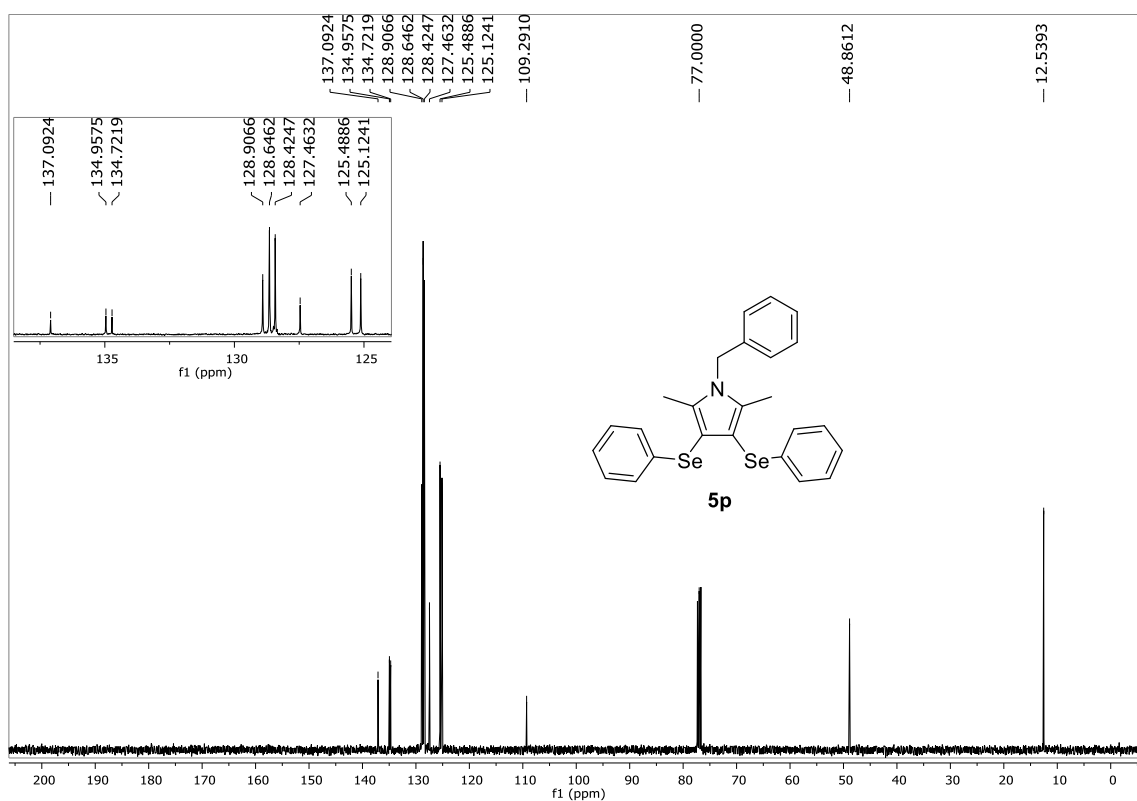


Figura 100. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 5p.

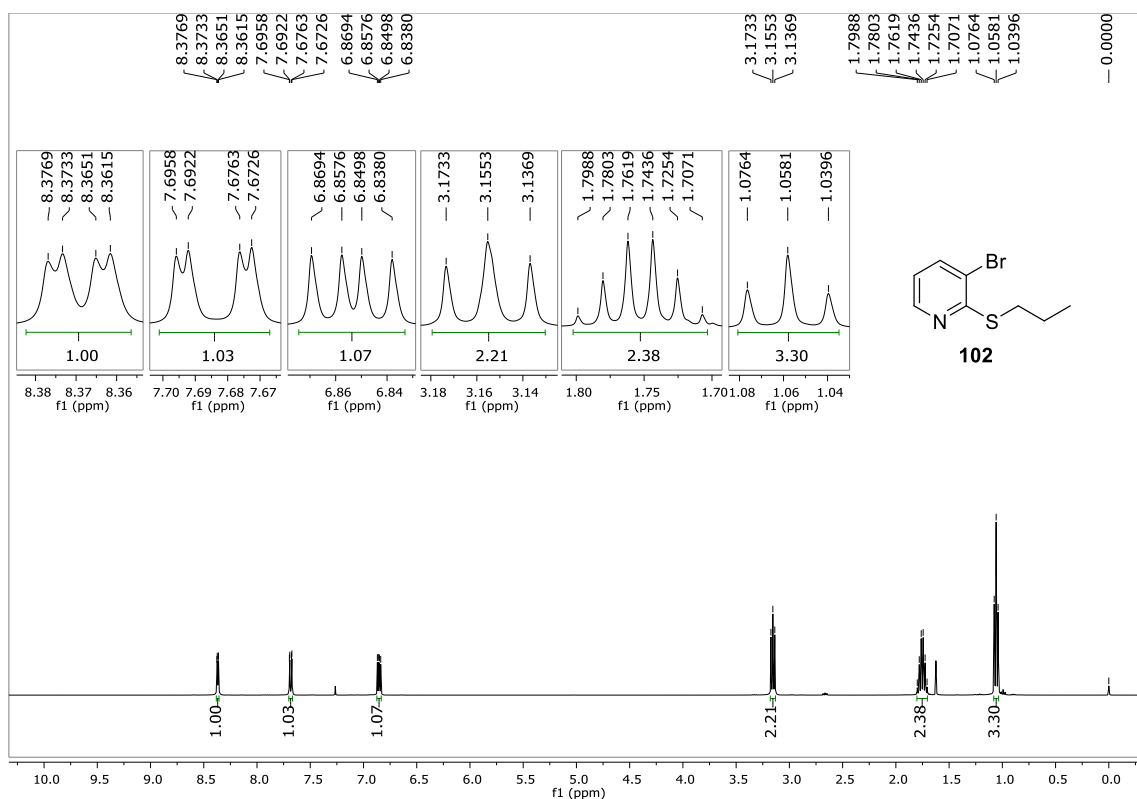


Figura 101. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **102a**.

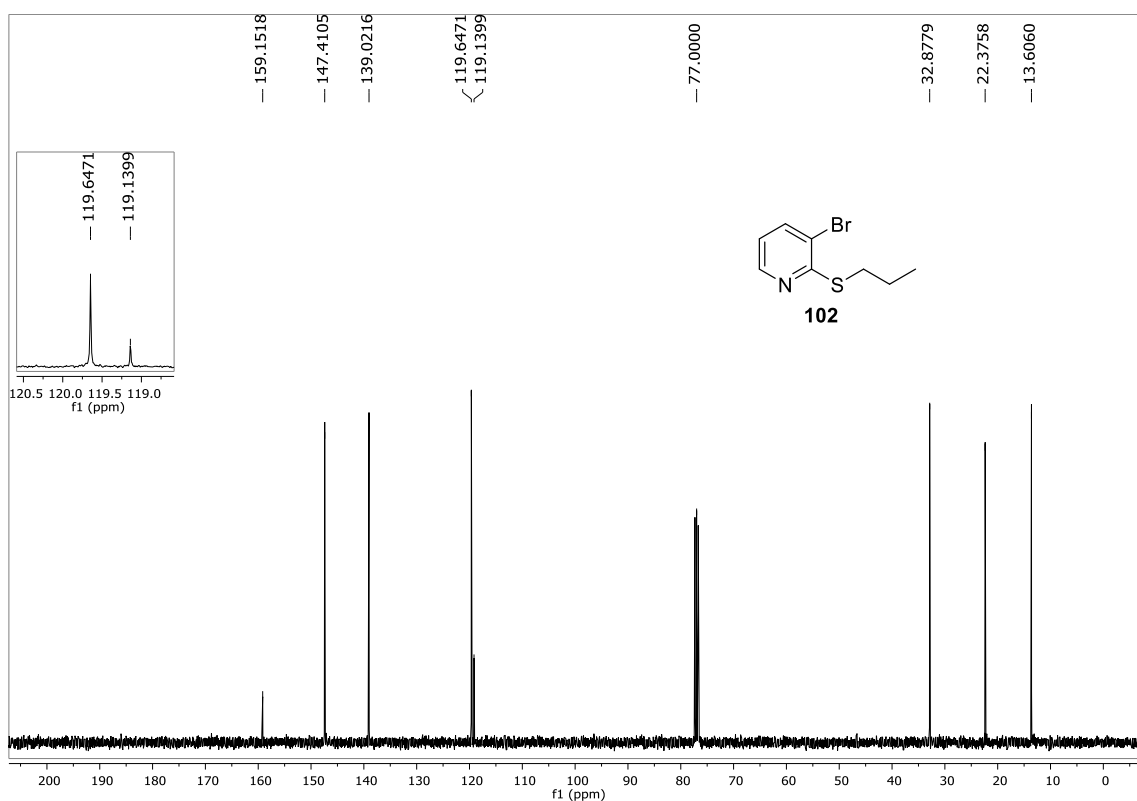


Figura 102. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **102a**.

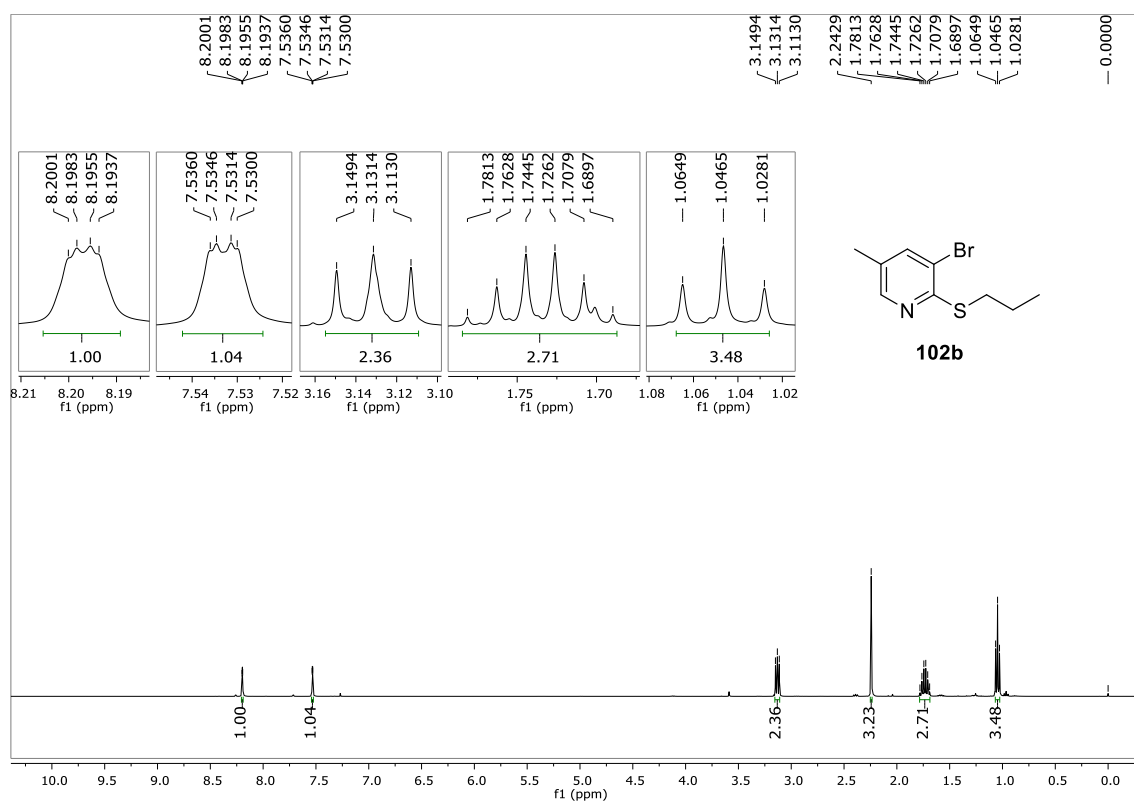


Figura 103. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **102b**.

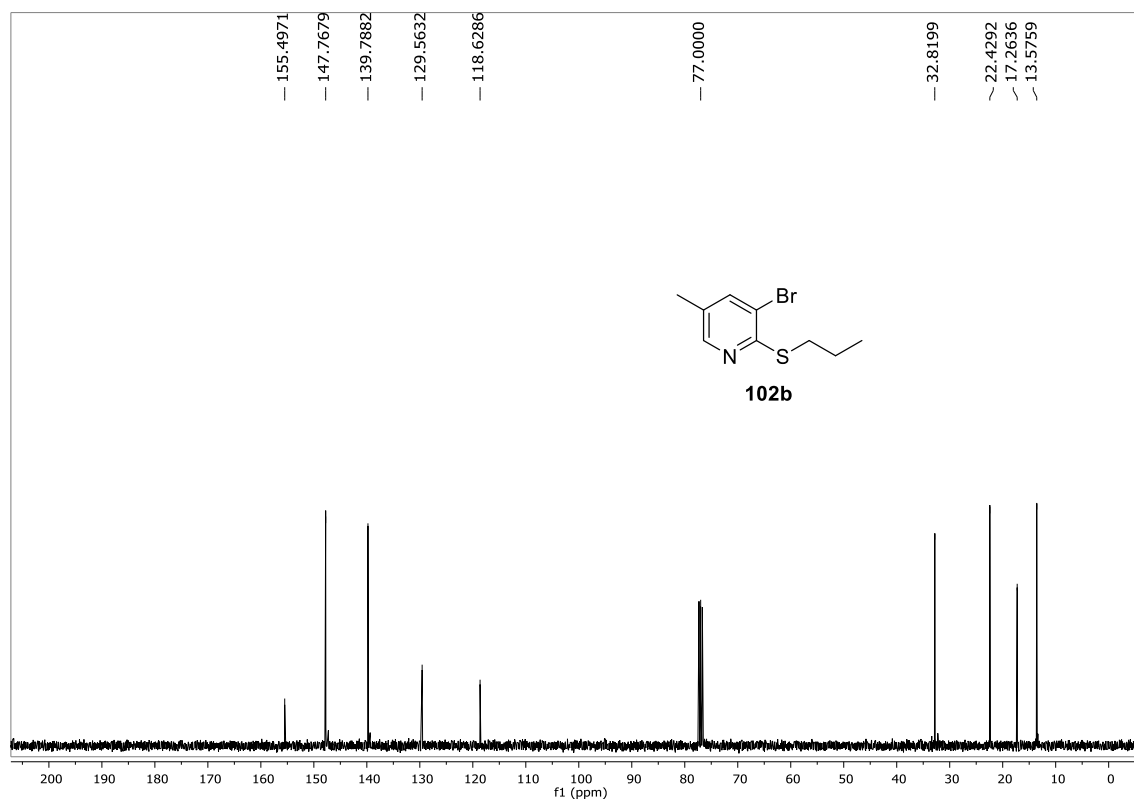


Figura 104. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **102b**.

6. Espectros Seleccionados

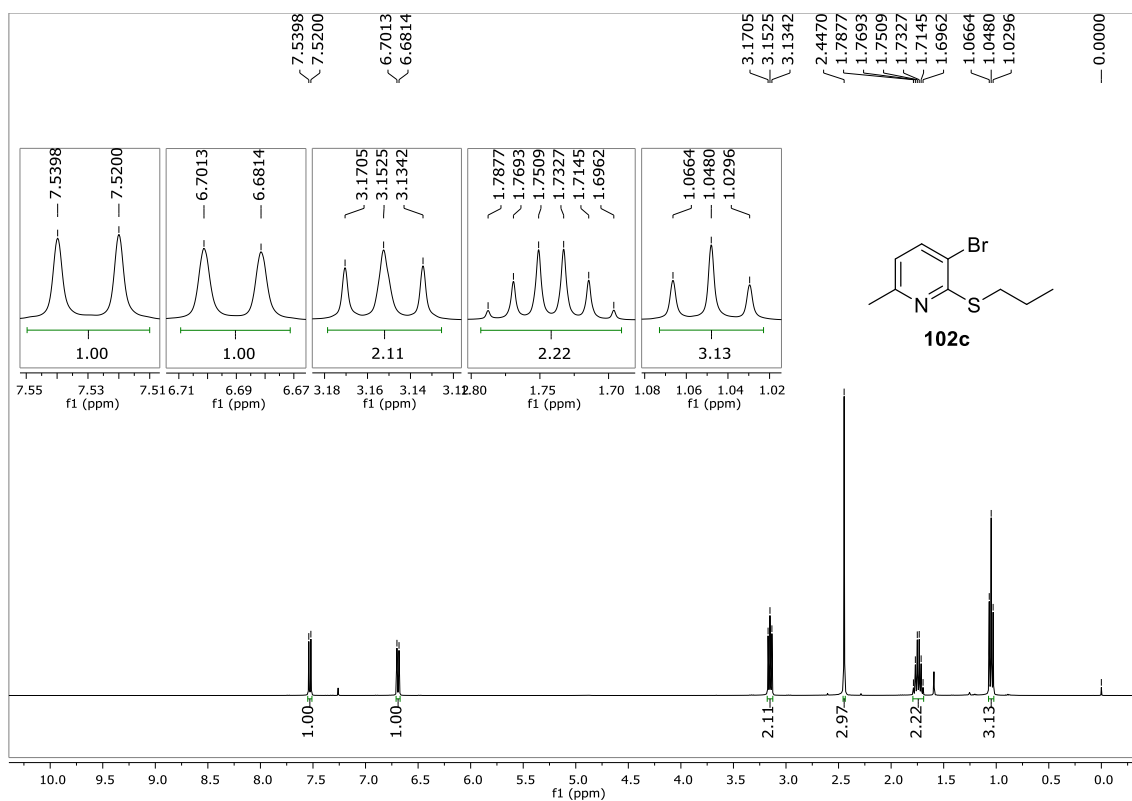


Figura 105. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **102c**.

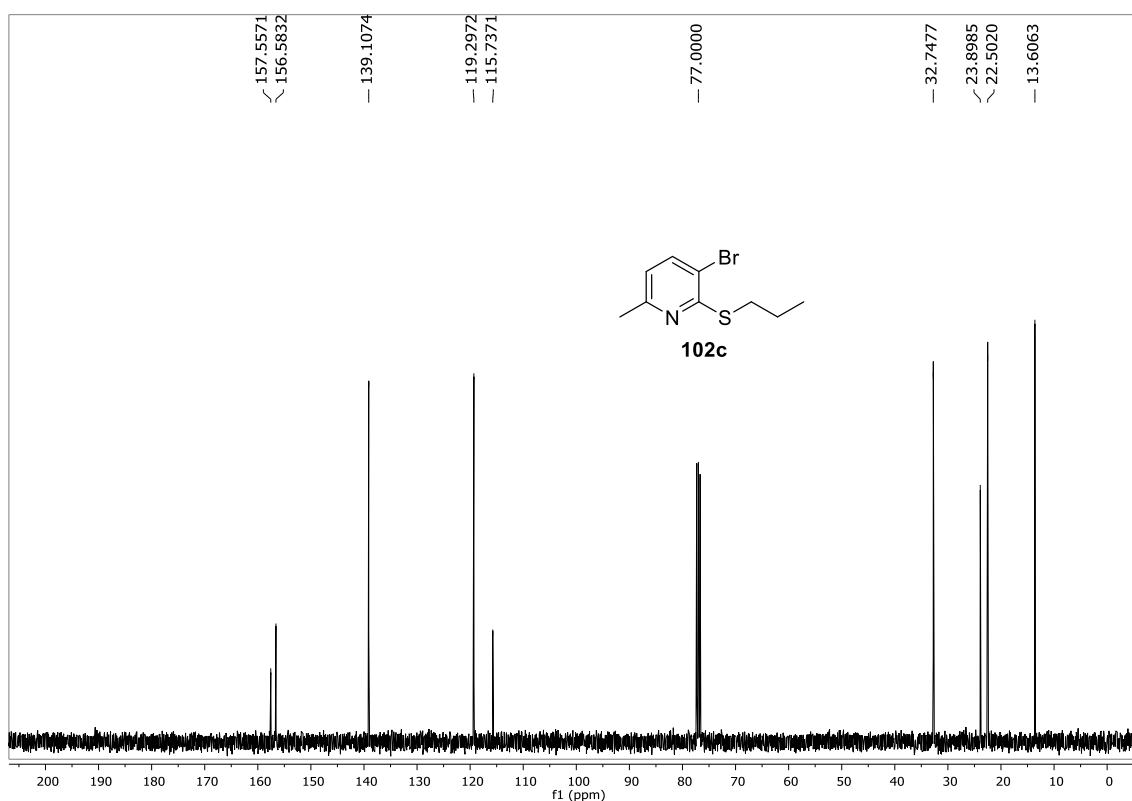


Figura 106. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **102c**.

6. Espectros Seleccionados

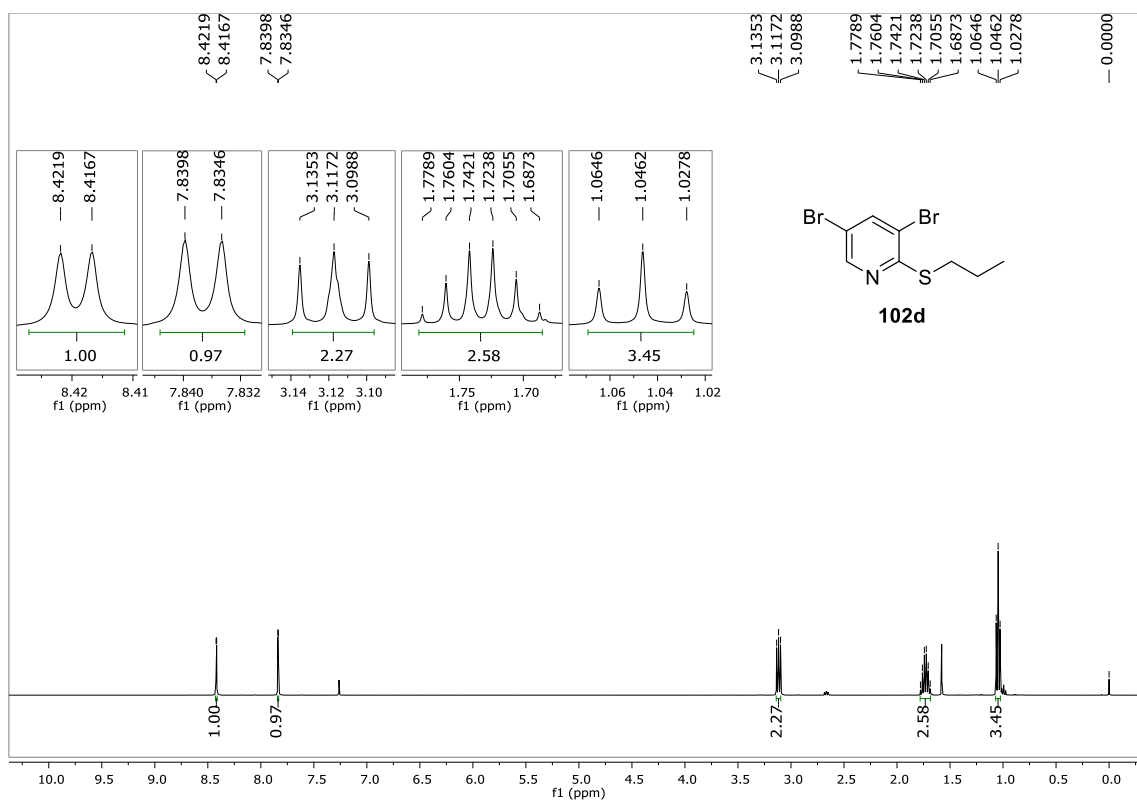


Figura 107. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **102d**.

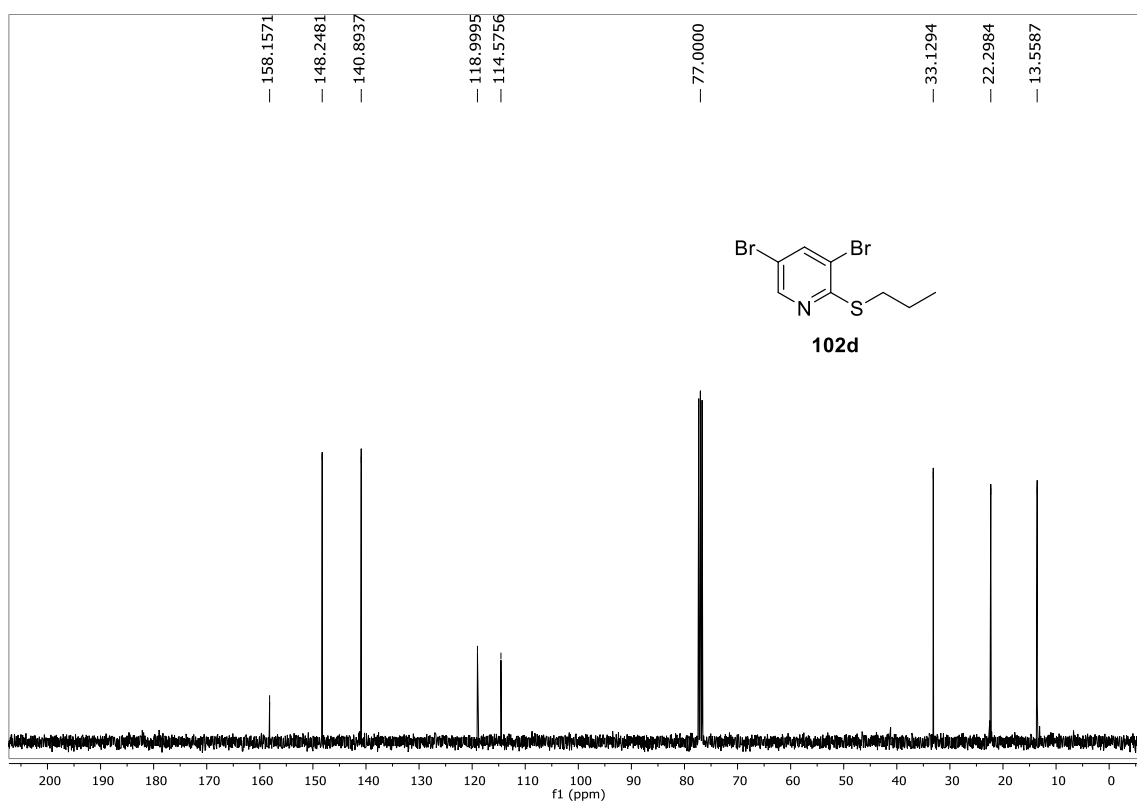


Figura 108. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **102d**.

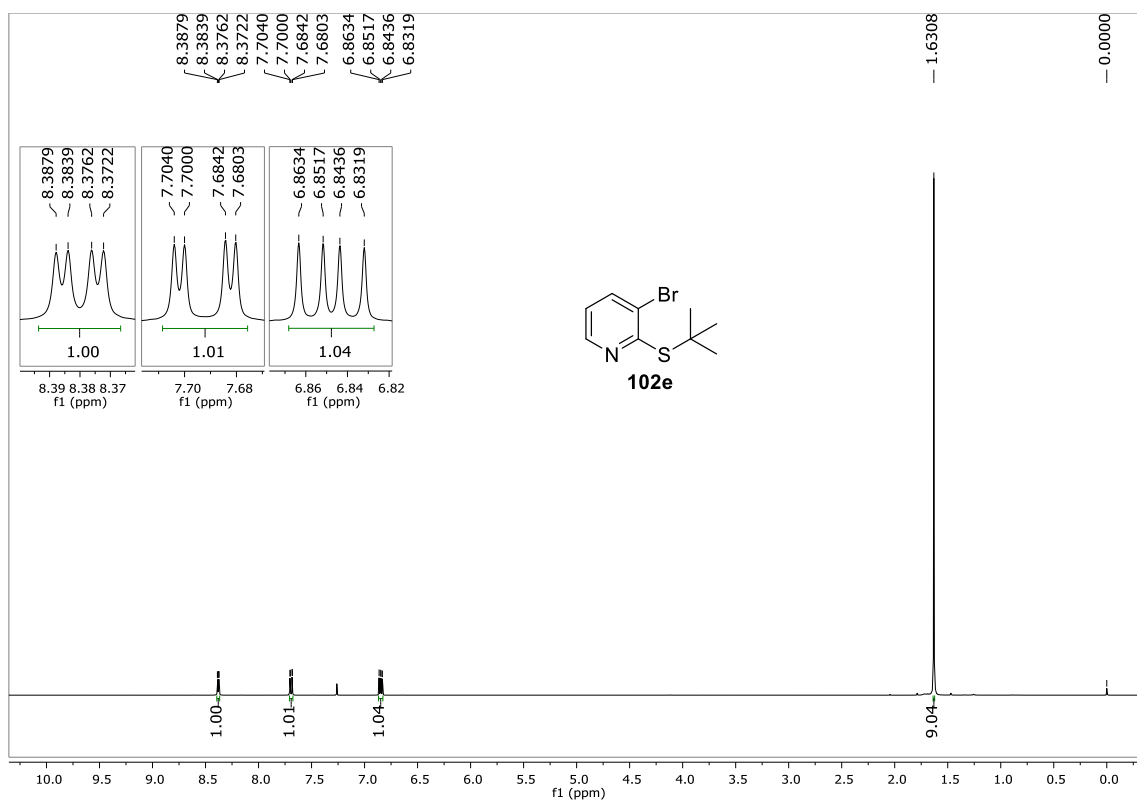


Figura 109. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **102e**.

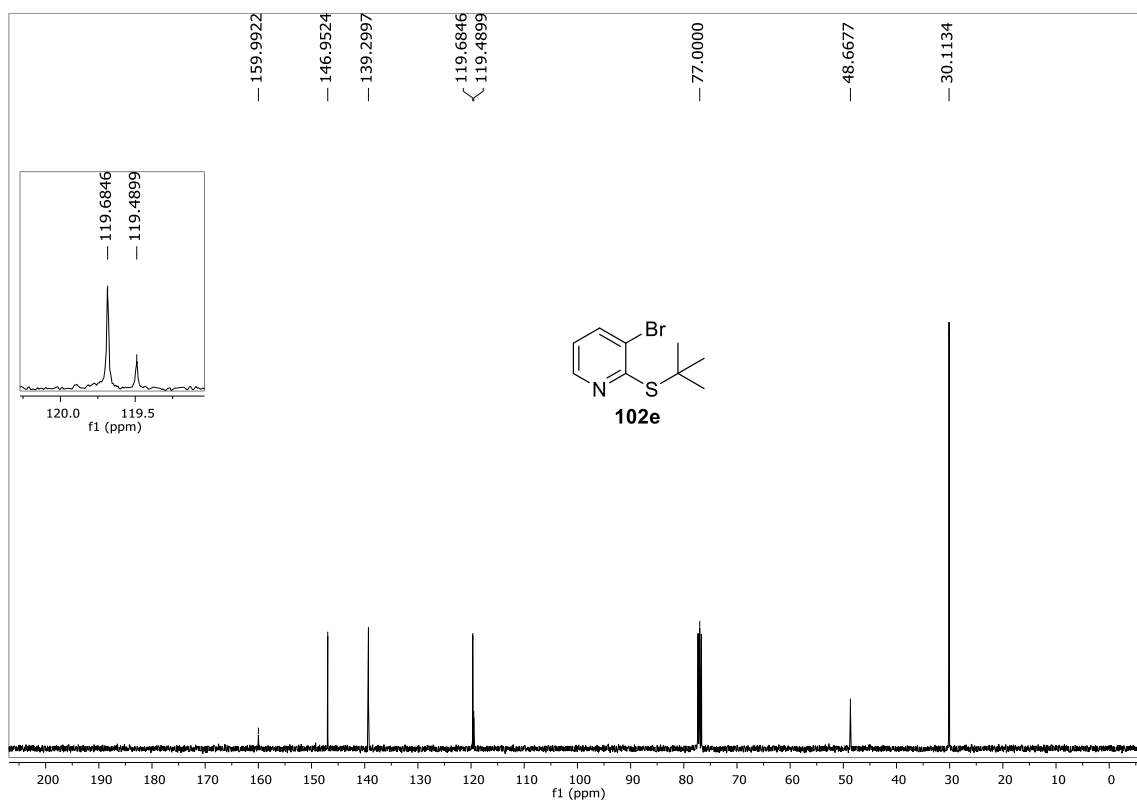


Figura 110. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **102e**.

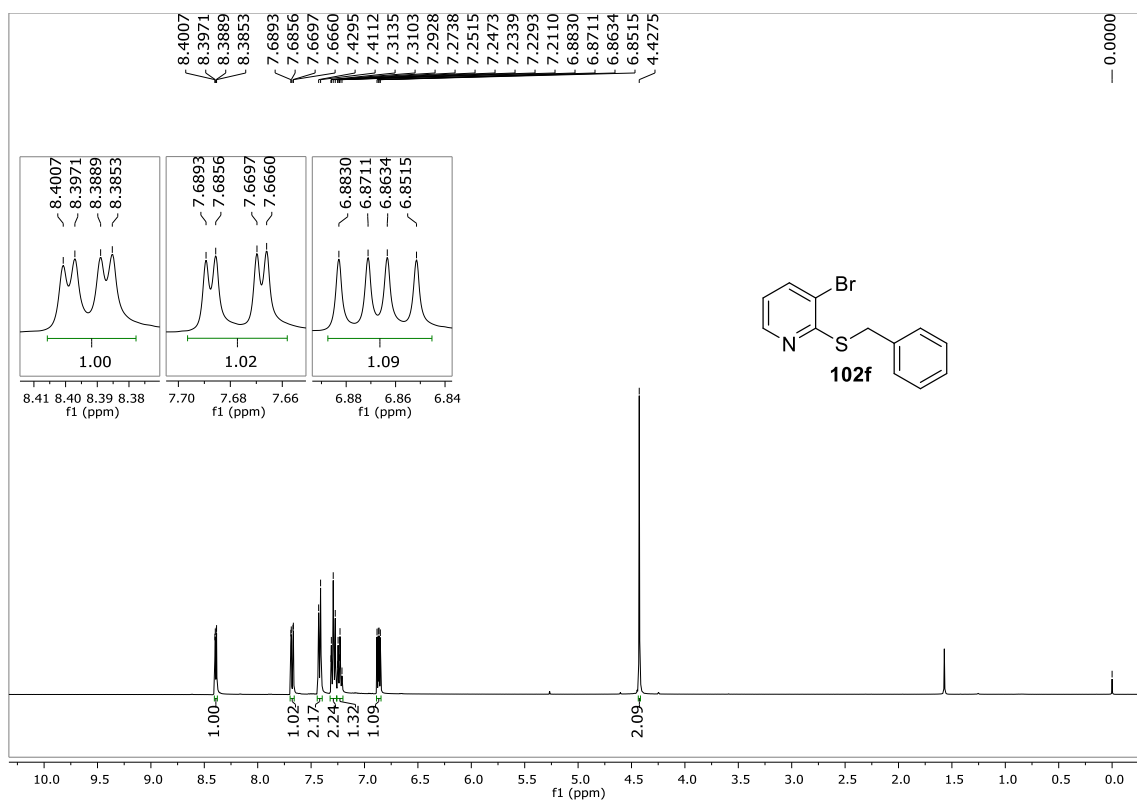


Figura 111. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **102f**.

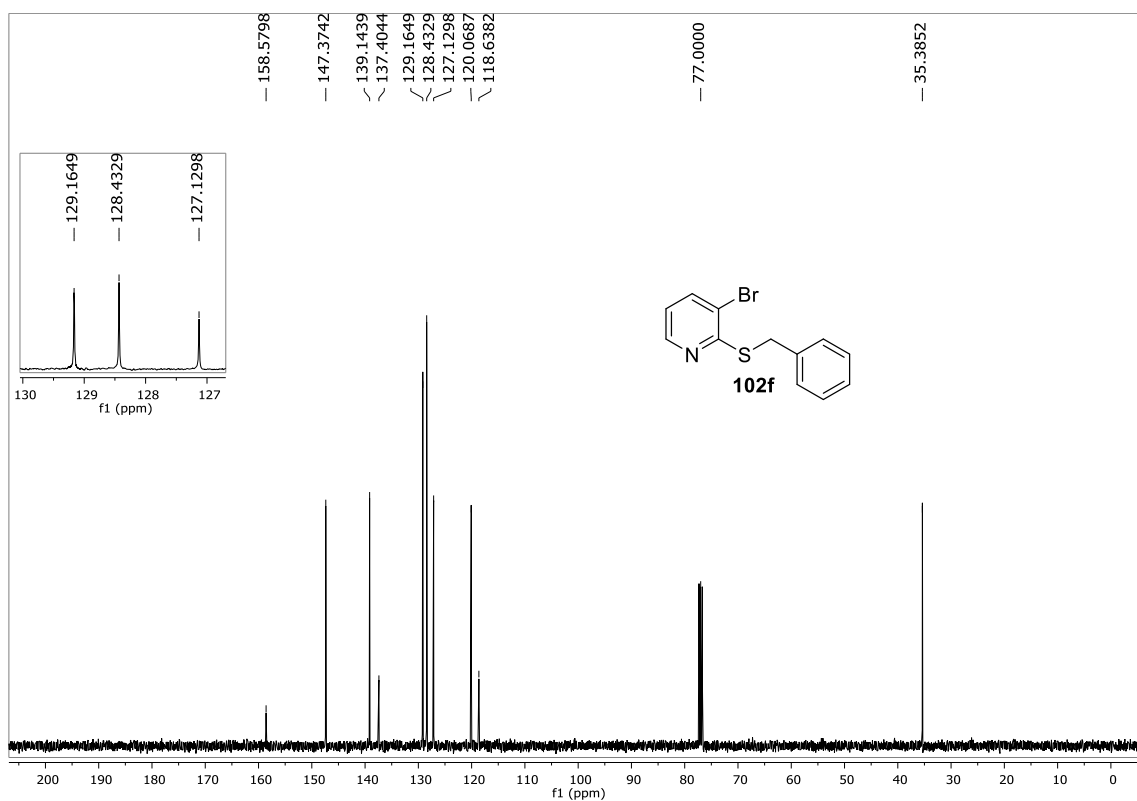


Figura 112. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **102f**.

6. Espectros Seleccionados

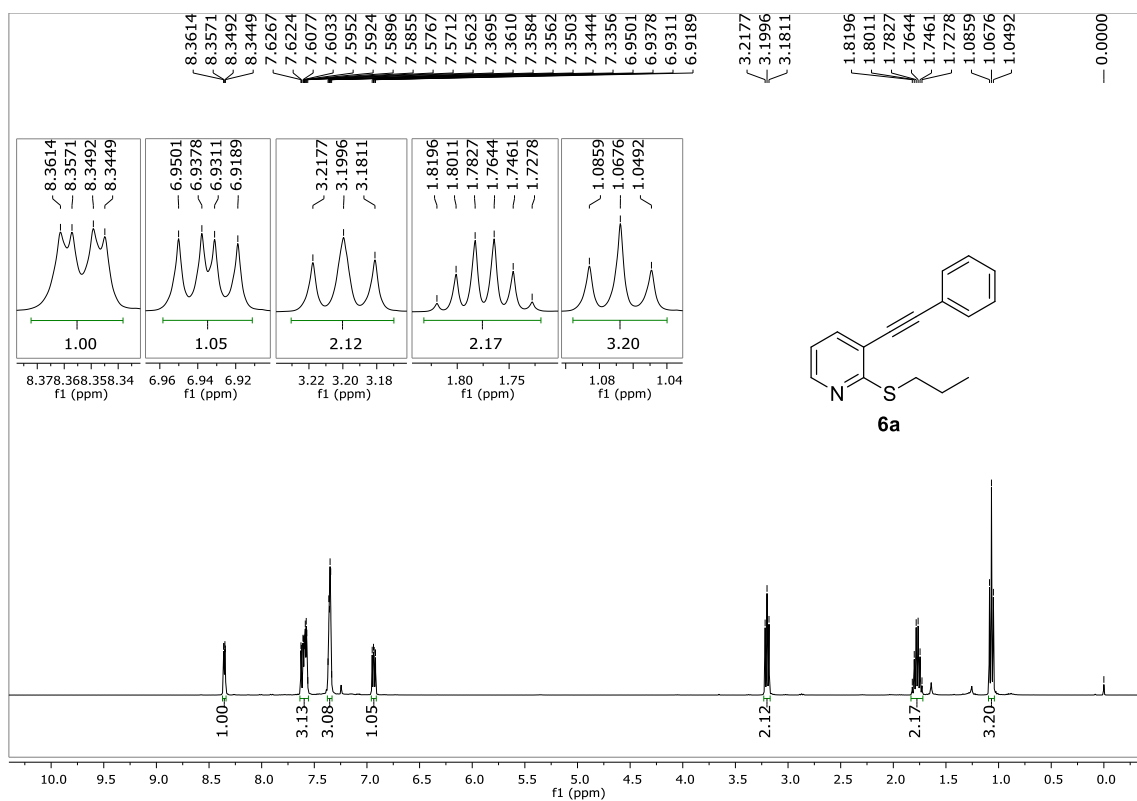


Figura 113. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 6a.

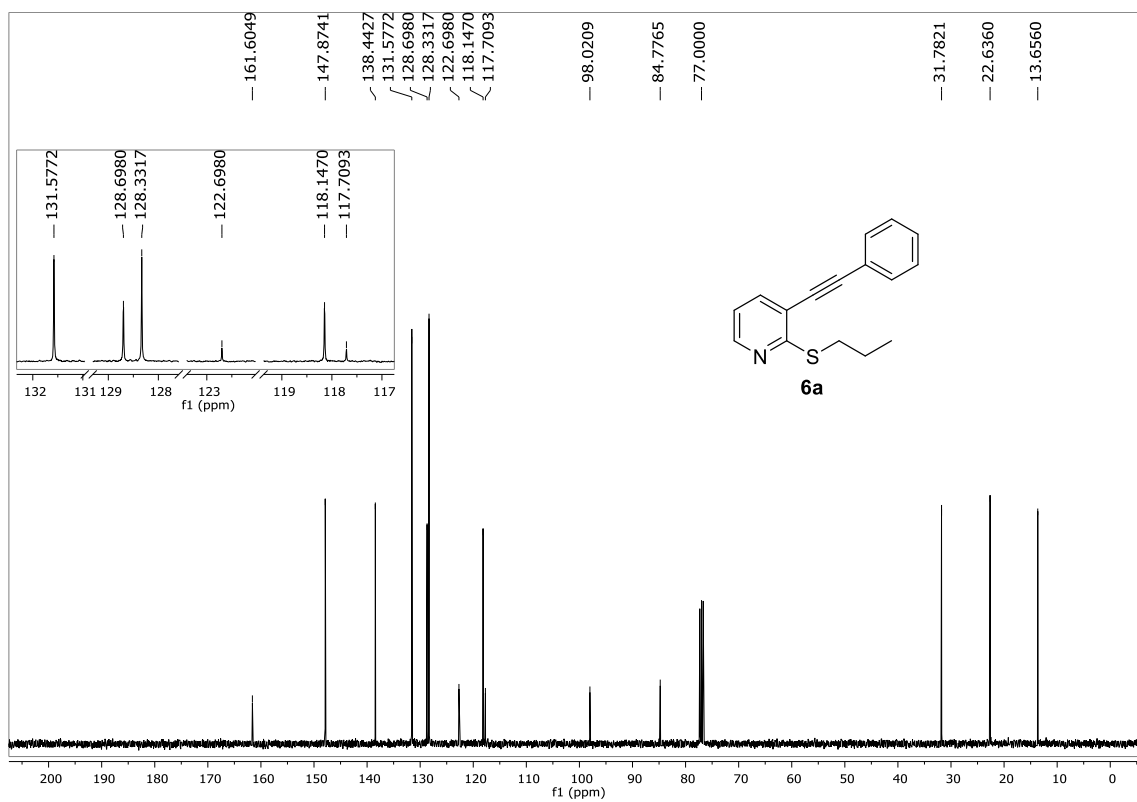


Figura 114. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 6a.

6. Espectros Seleccionados

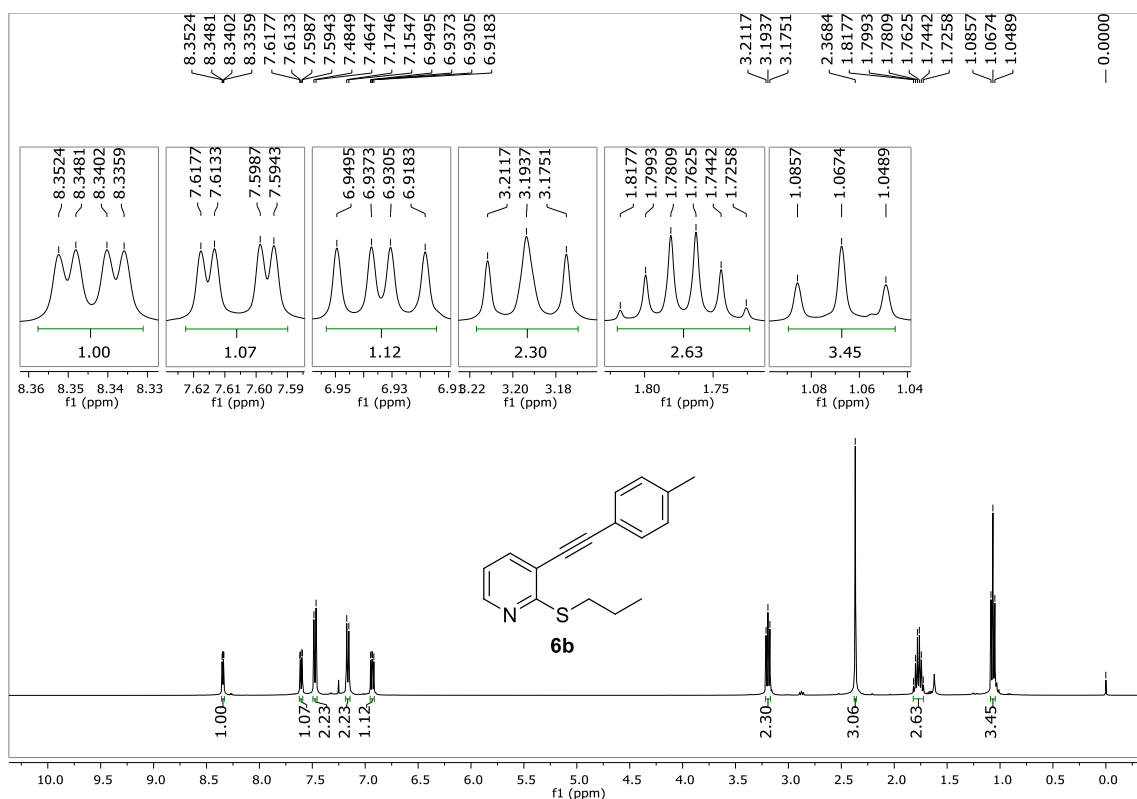


Figura 115. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **6b**.

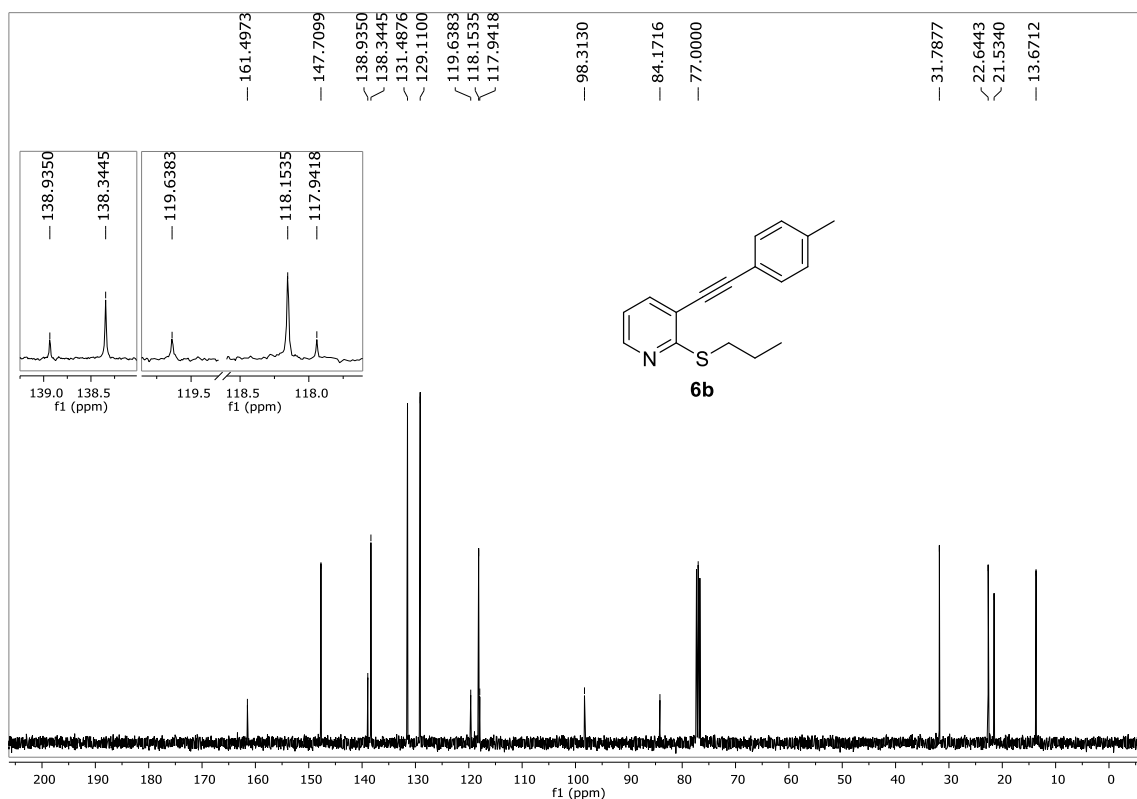


Figura 116. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **6b**.

6. Espectros Seleccionados

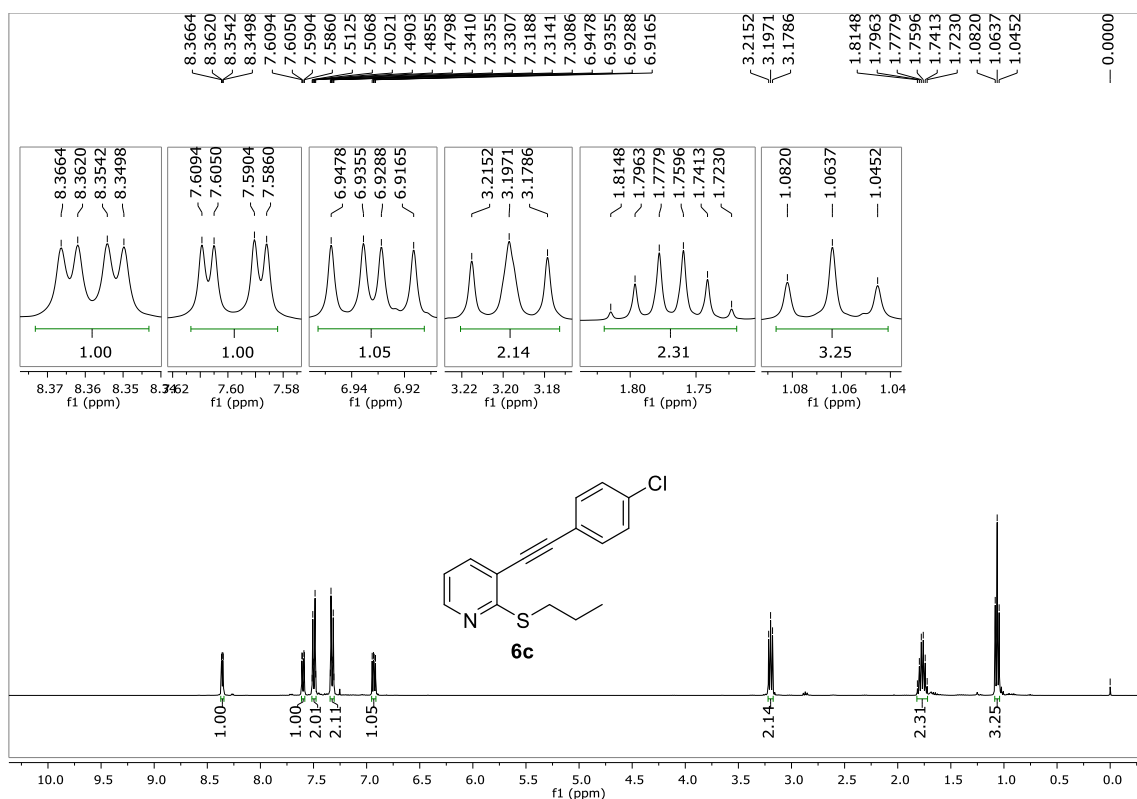


Figura 117. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **6c**.

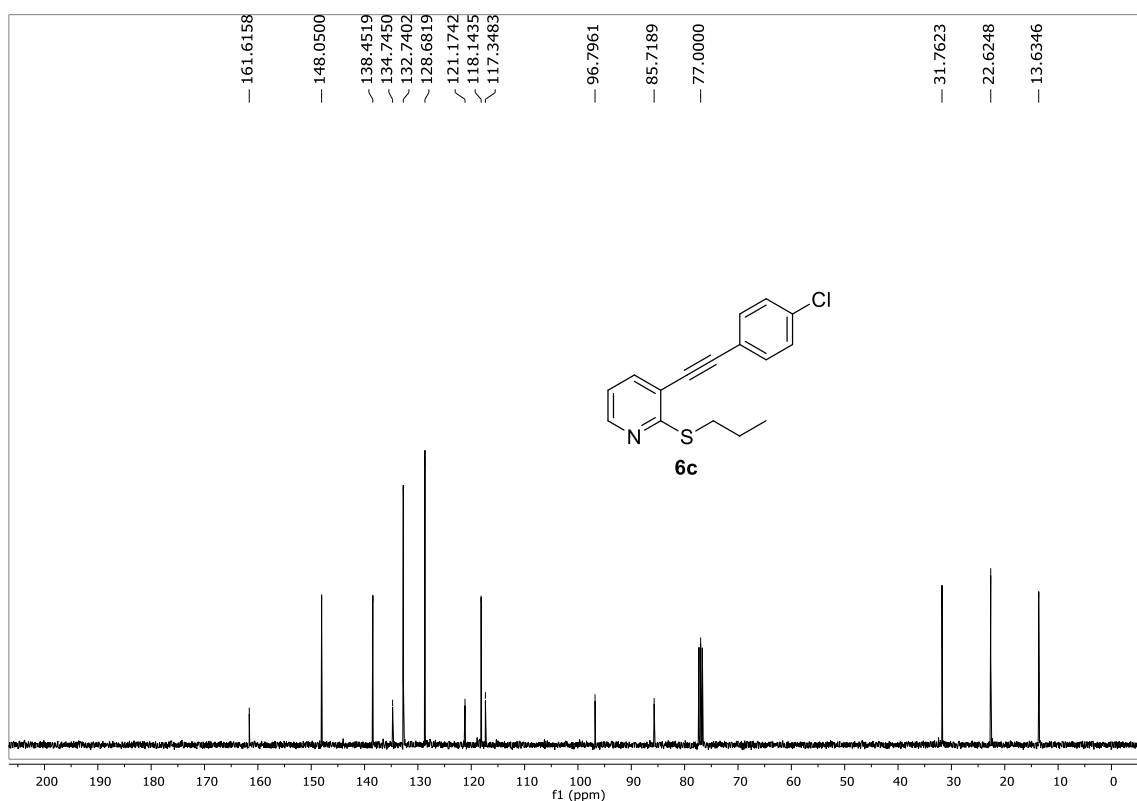


Figura 118. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **6c**.

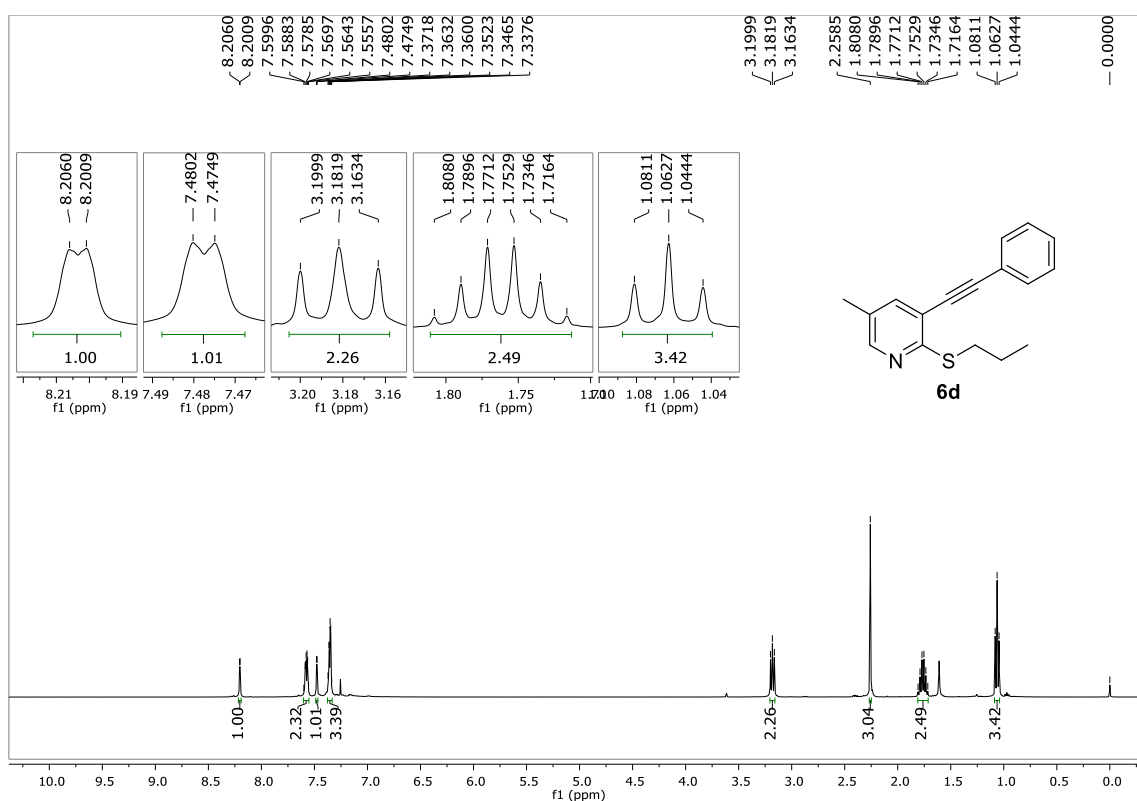


Figura 119. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 6d.

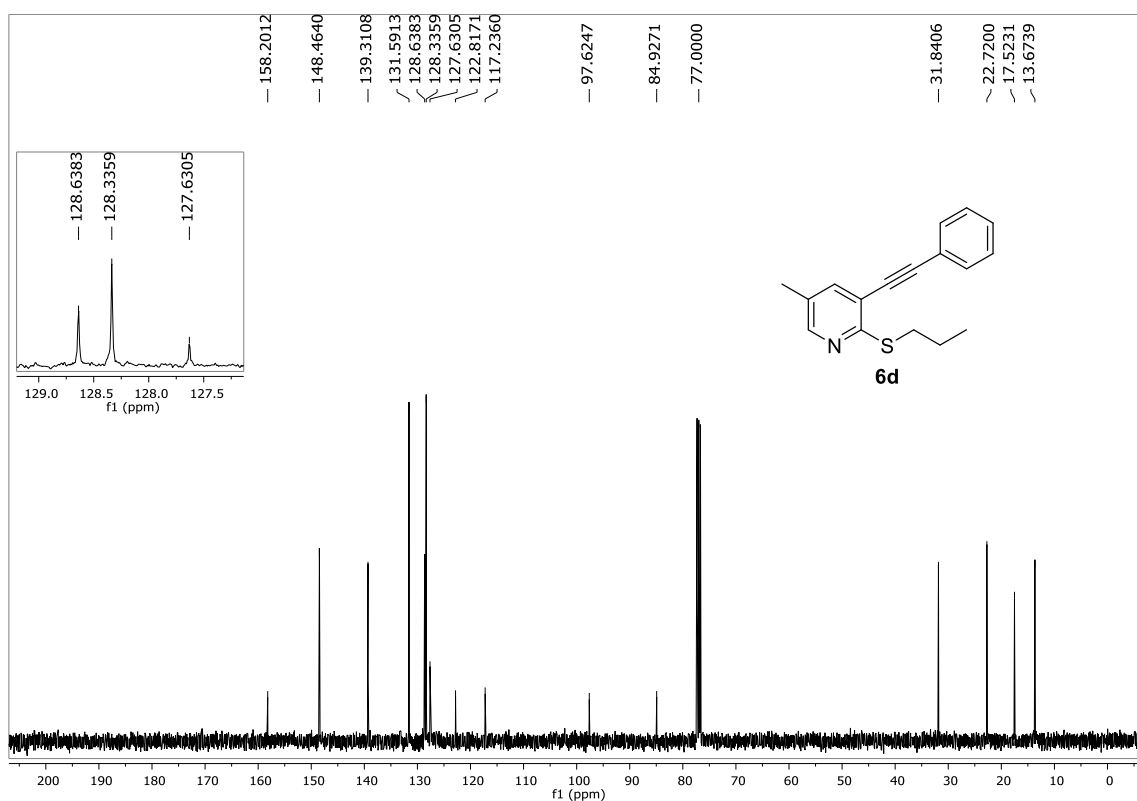


Figura 120. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 6d.

6. Espectros Seleccionados

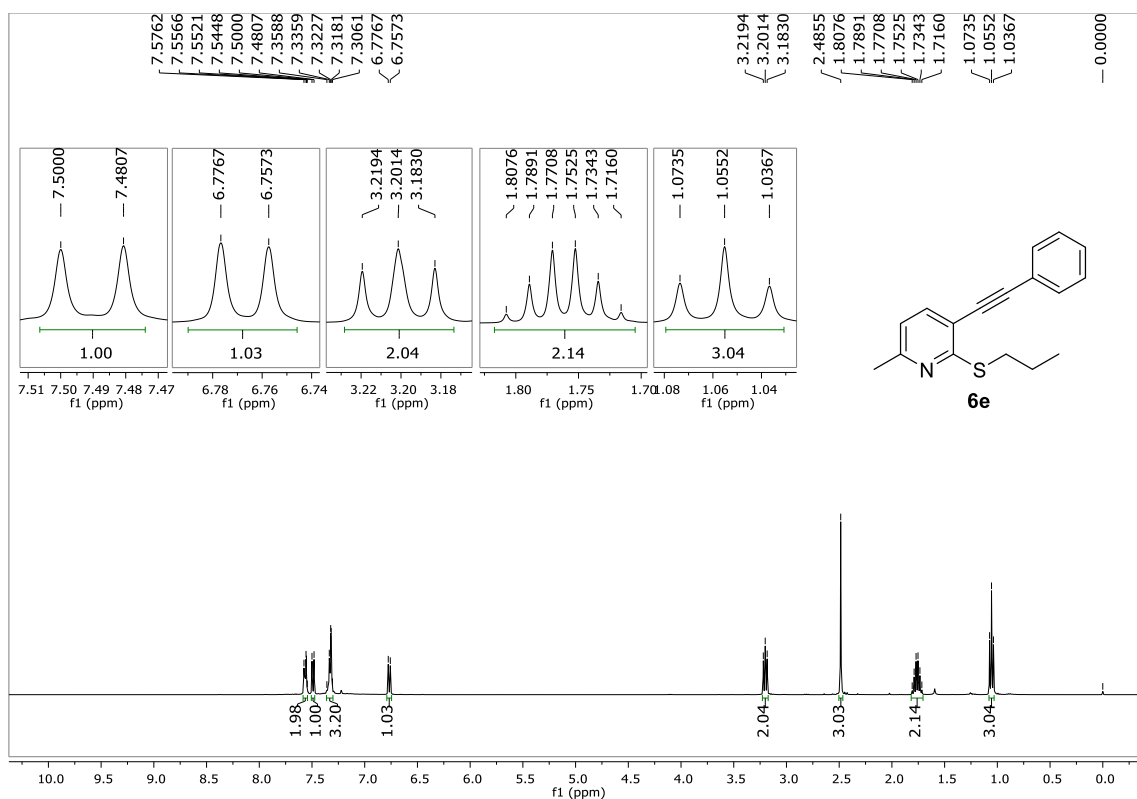


Figura 121. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **6e**.

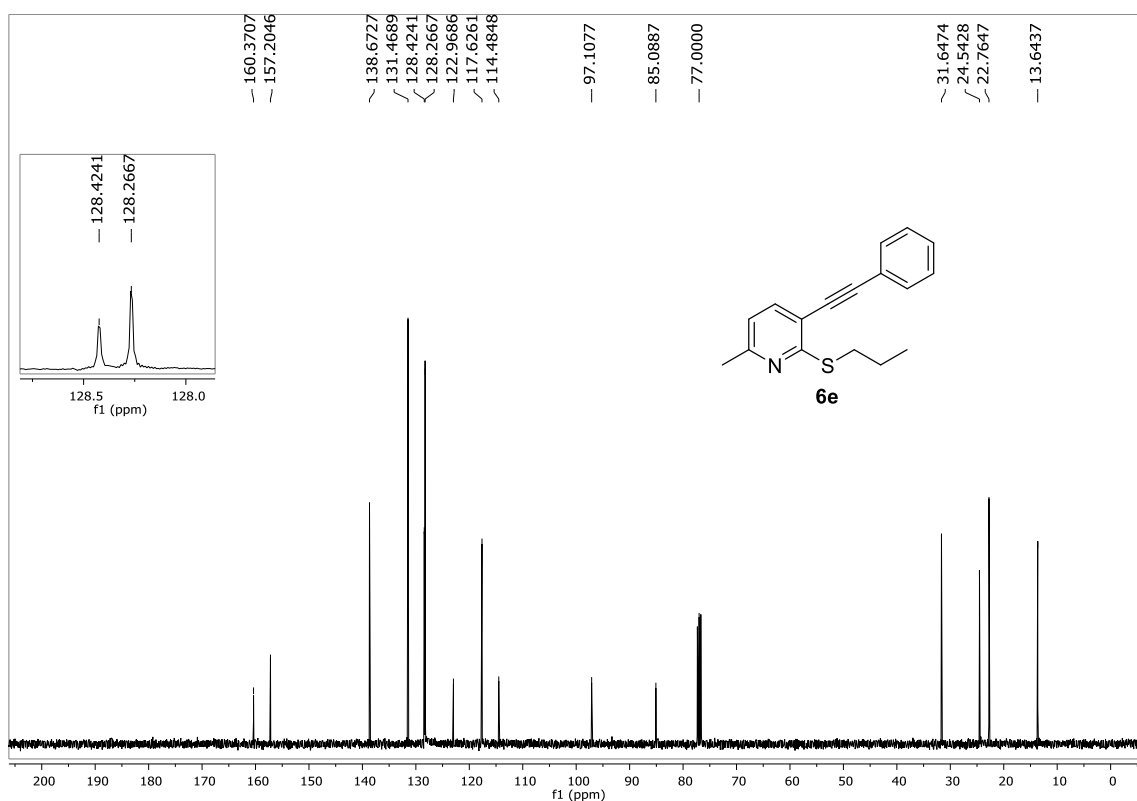


Figura 122. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **6e**.

6. Espectros Seleccionados

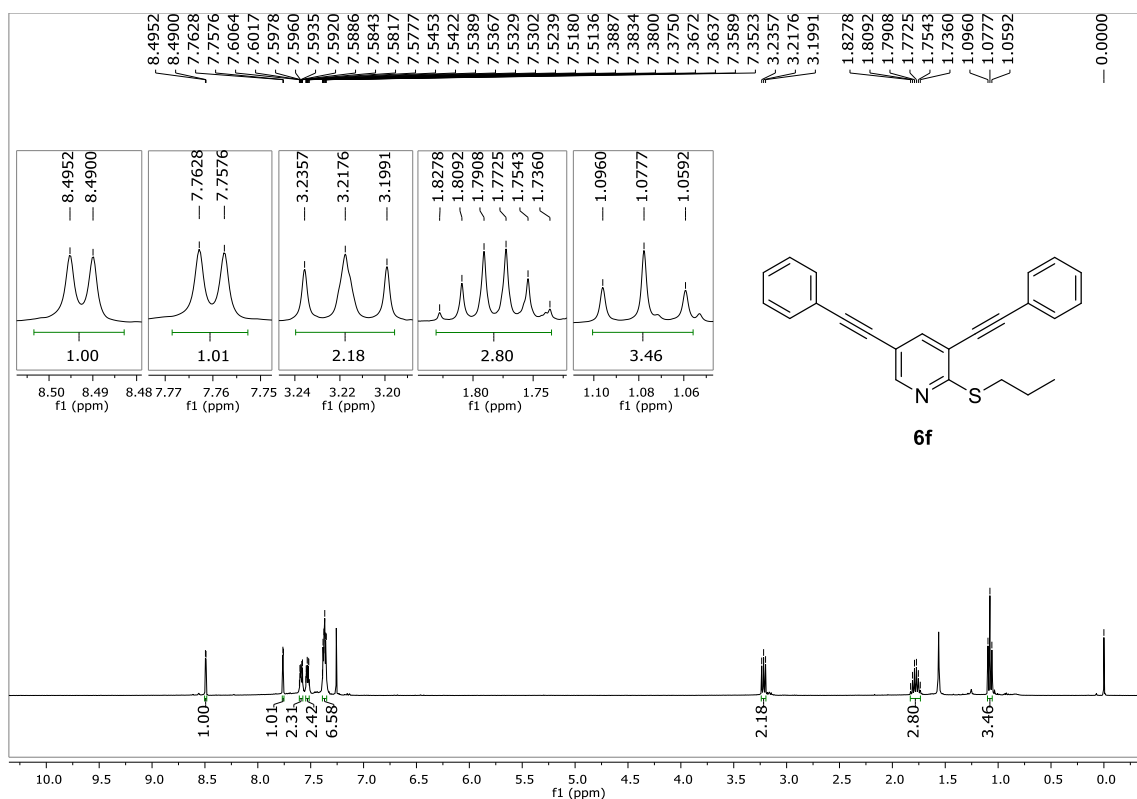


Figura 123. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **6f**.

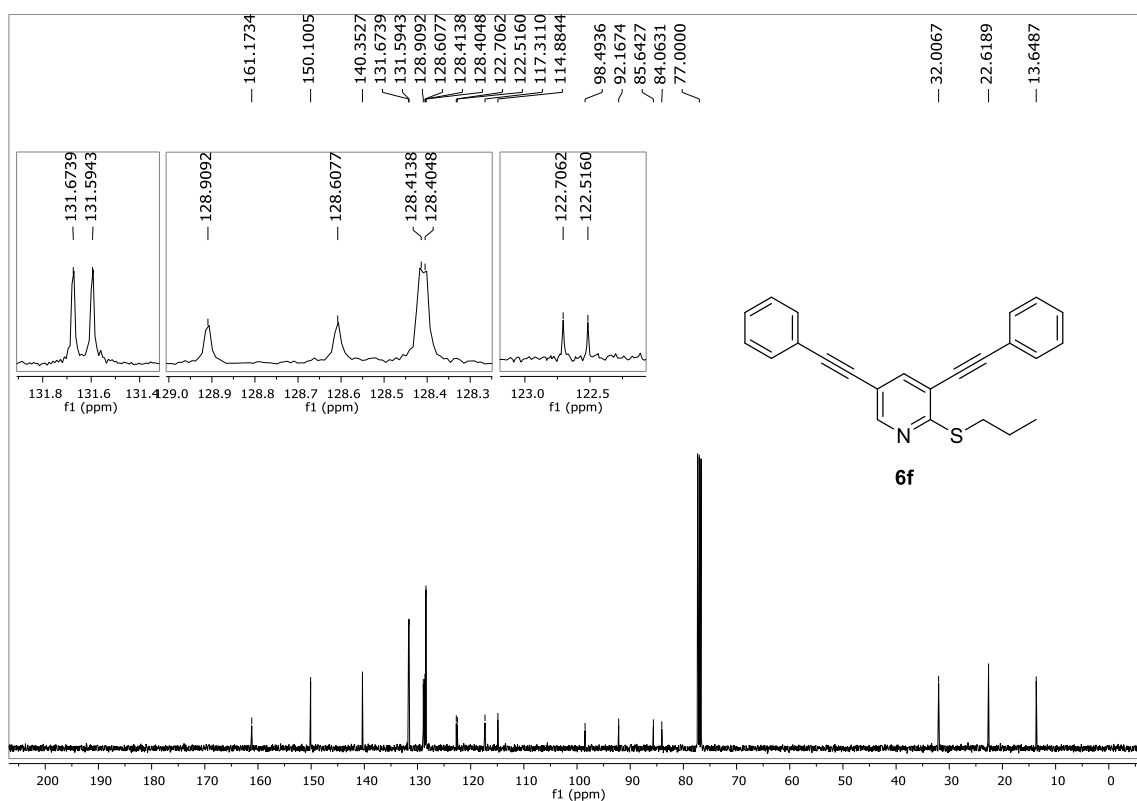


Figura 124. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **6f**.

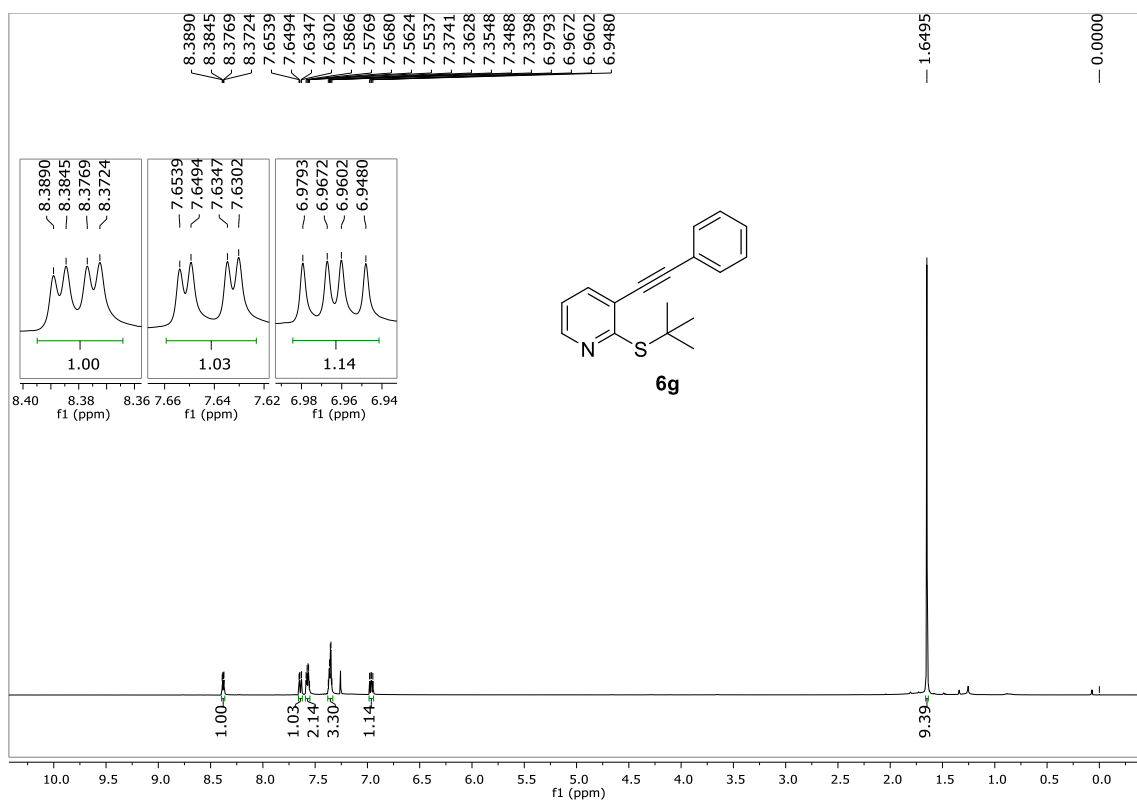


Figura 125. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **6g**.

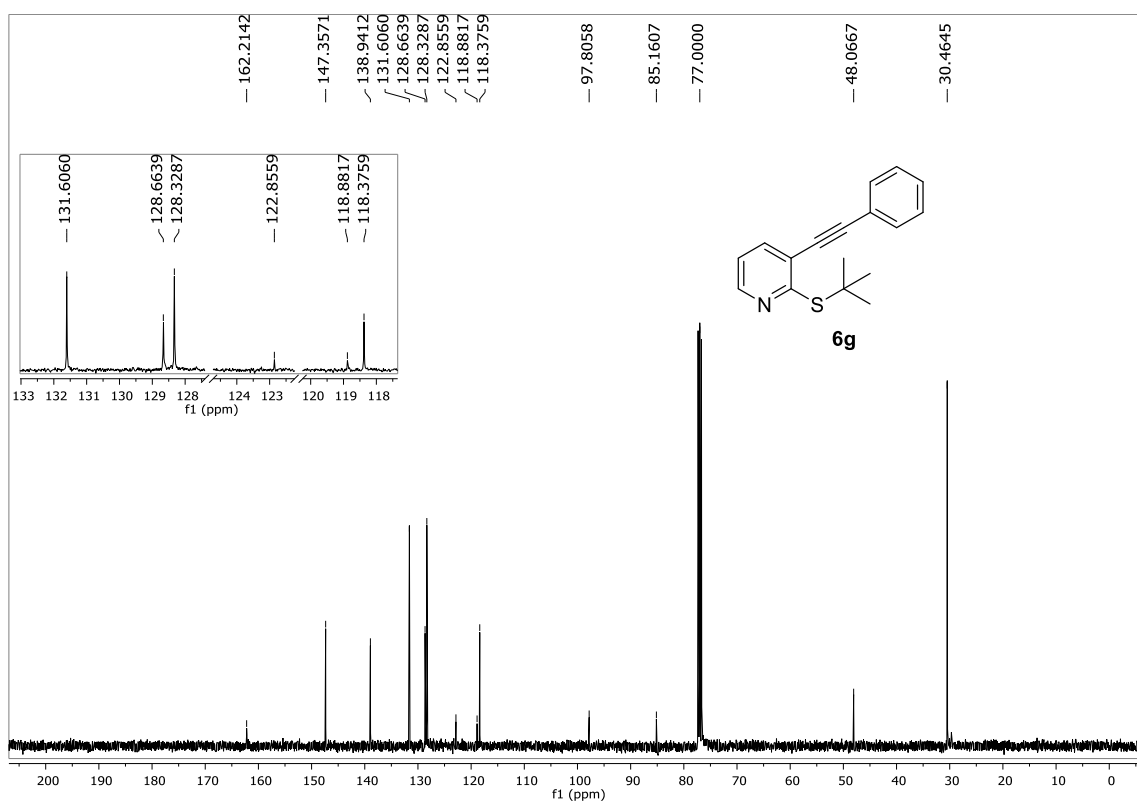


Figura 126. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **6g**.

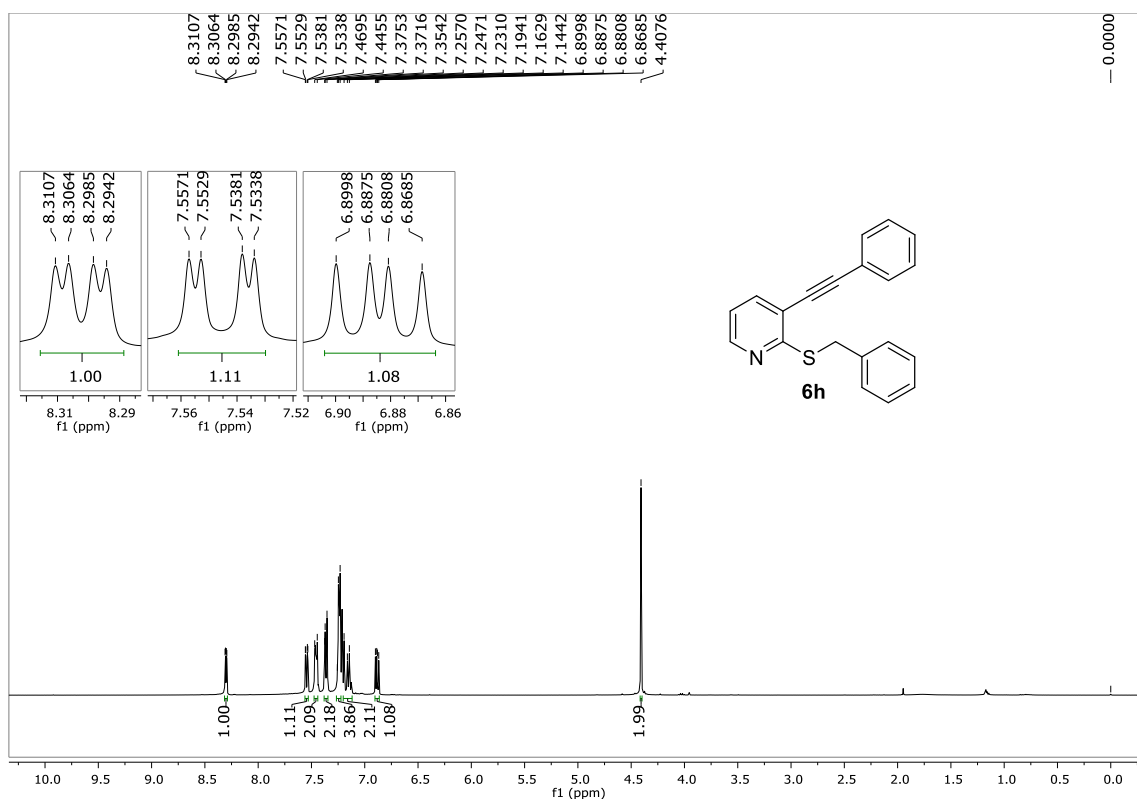


Figura 127. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 6h.

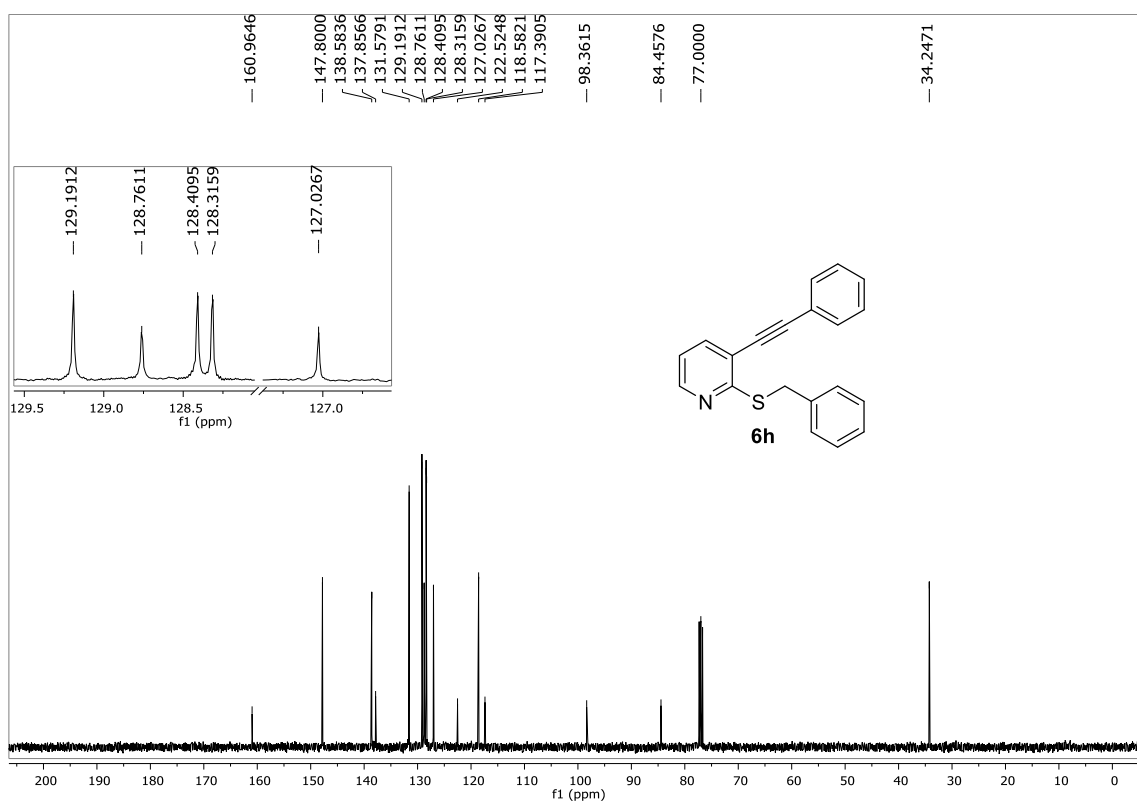


Figura 128. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 6h.

6. Espectros Seleccionados

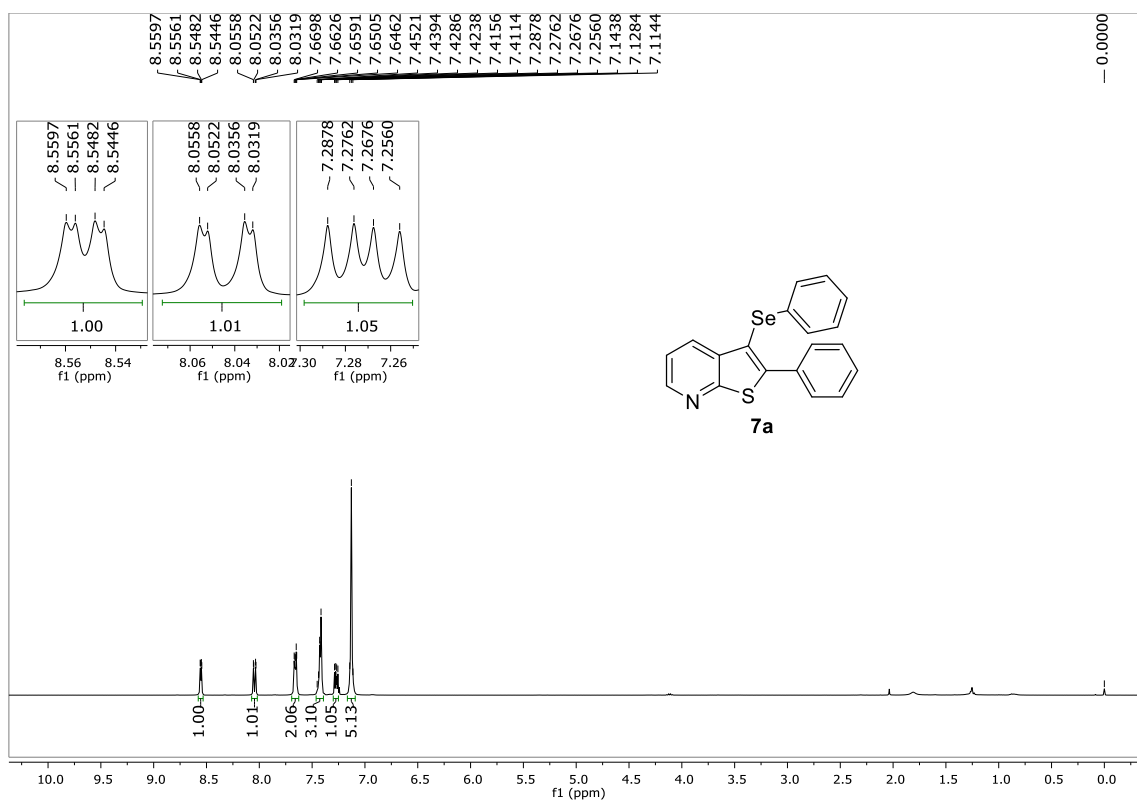


Figura 129. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 7a.

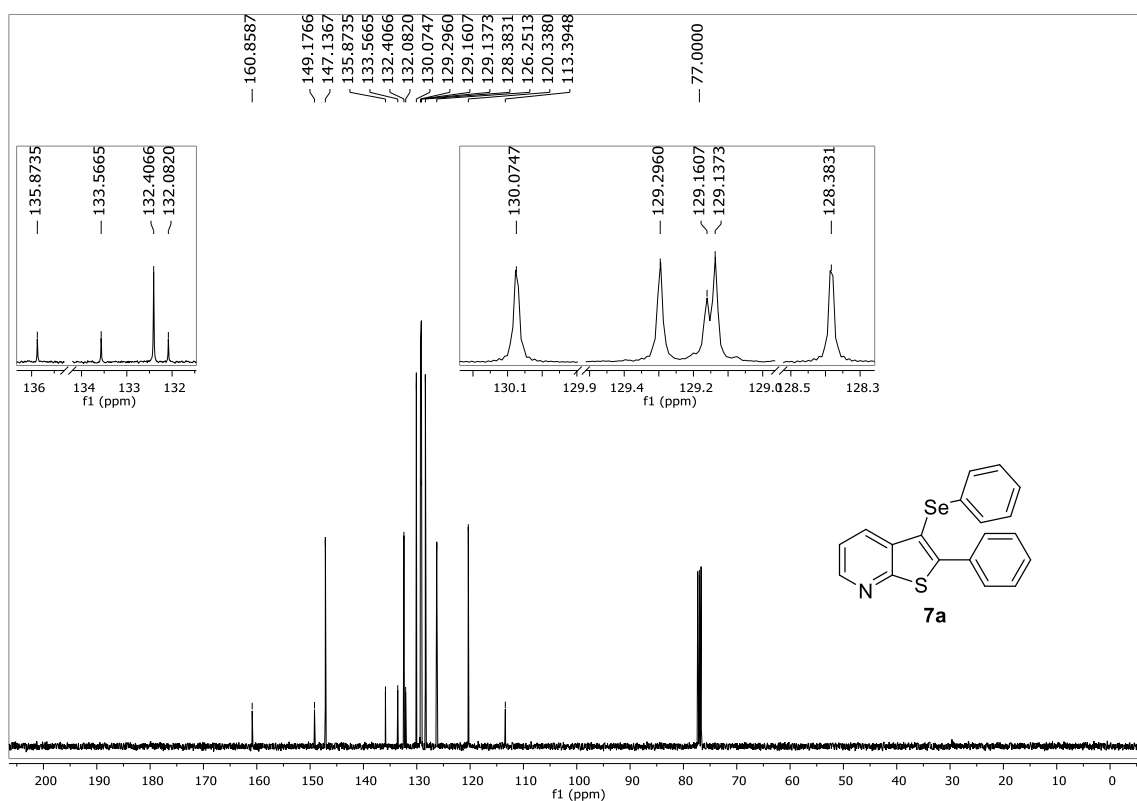


Figura 130. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 7a.

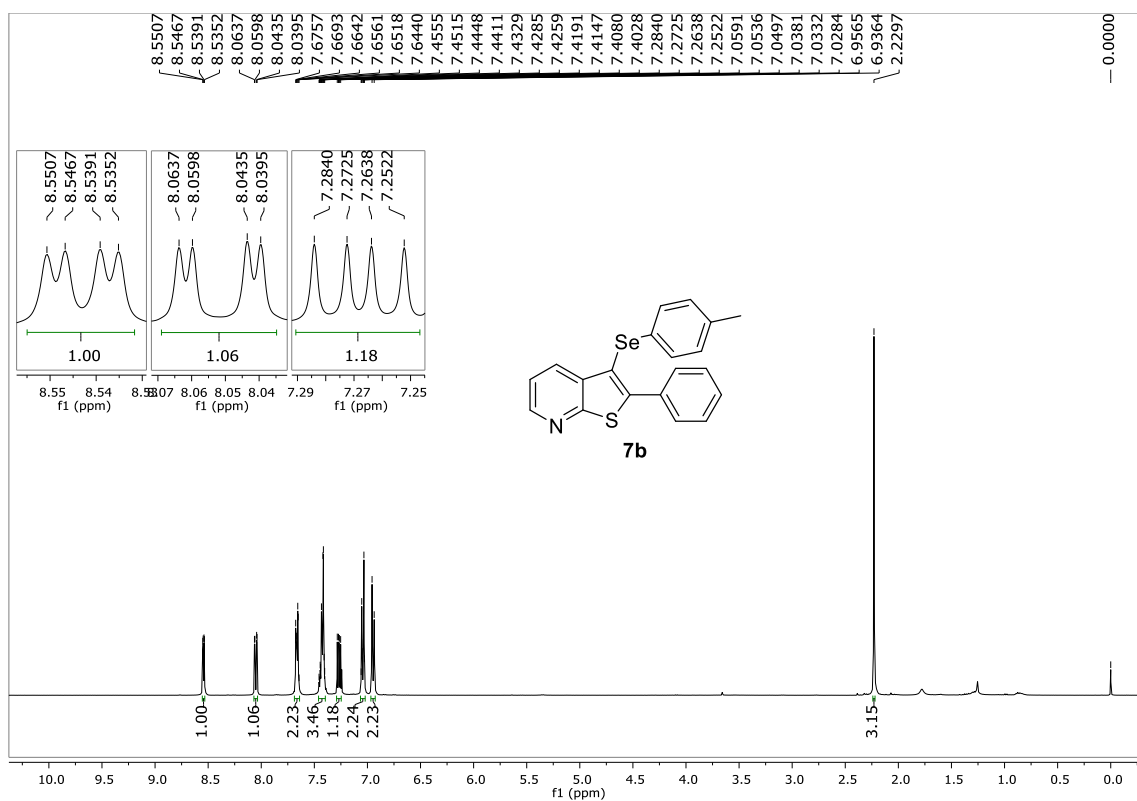


Figura 131. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 7b.

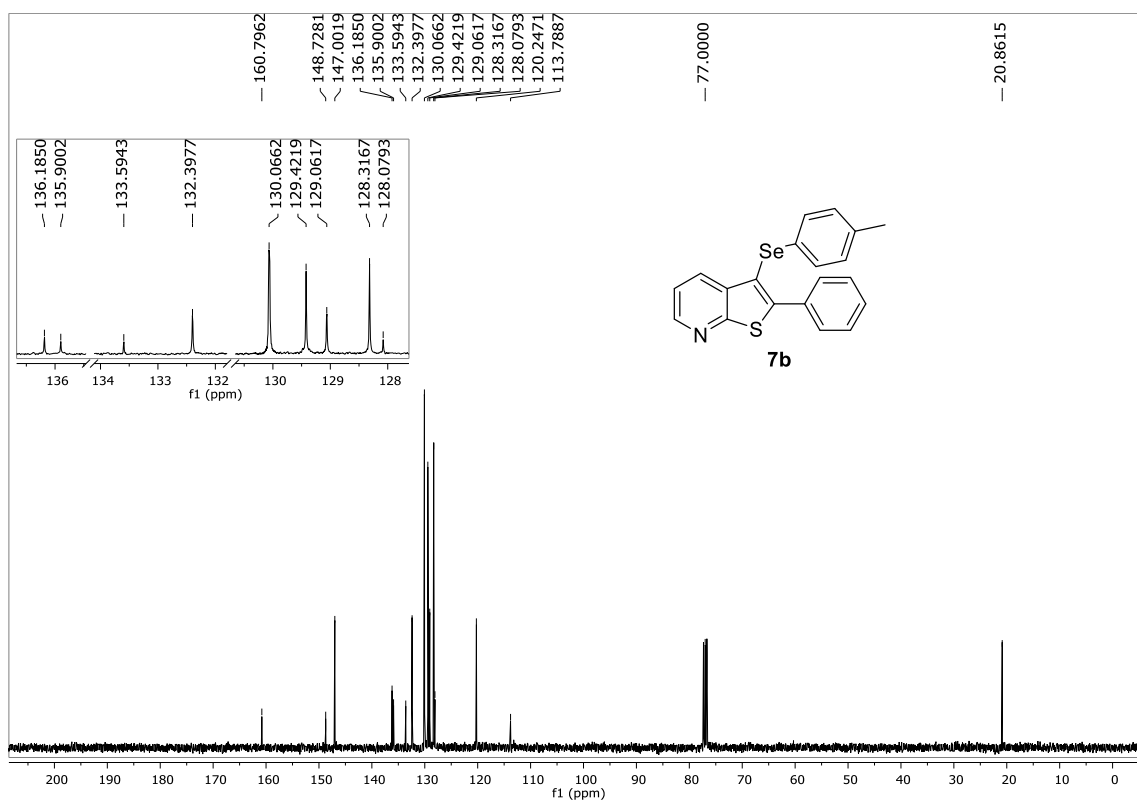


Figura 132. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 7b.

6. Espectros Seleccionados

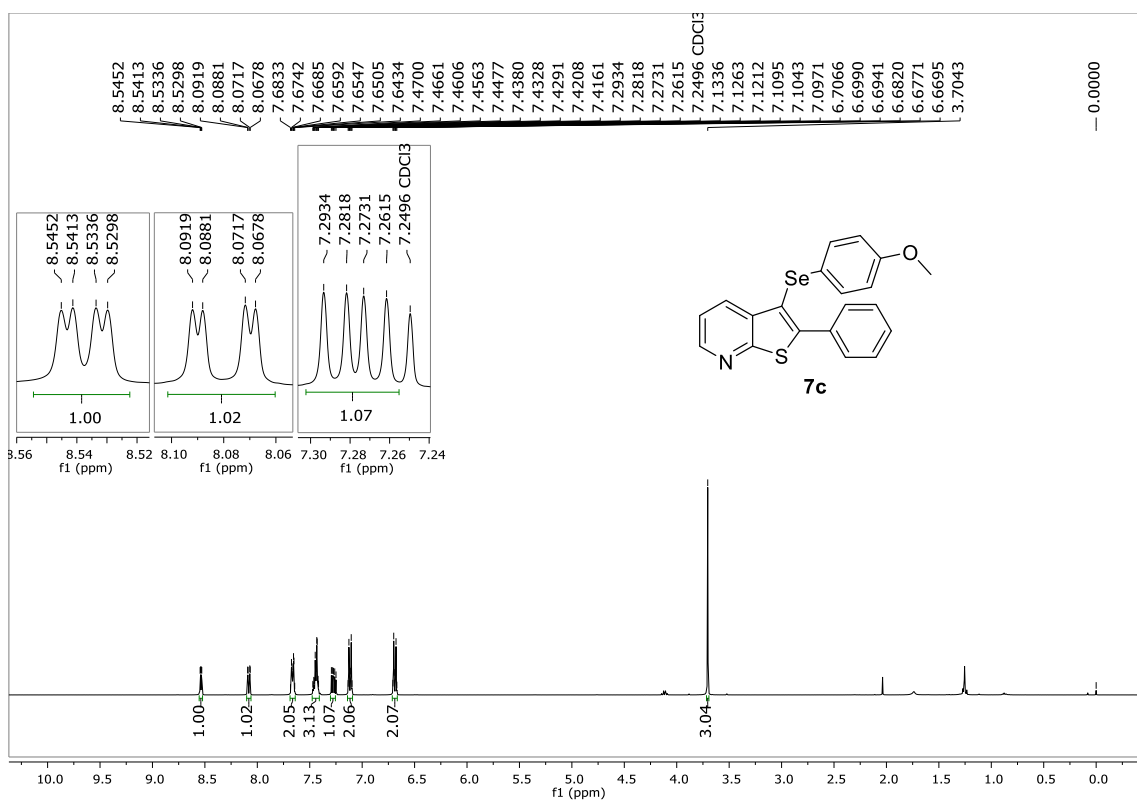


Figura 133. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **7c**.

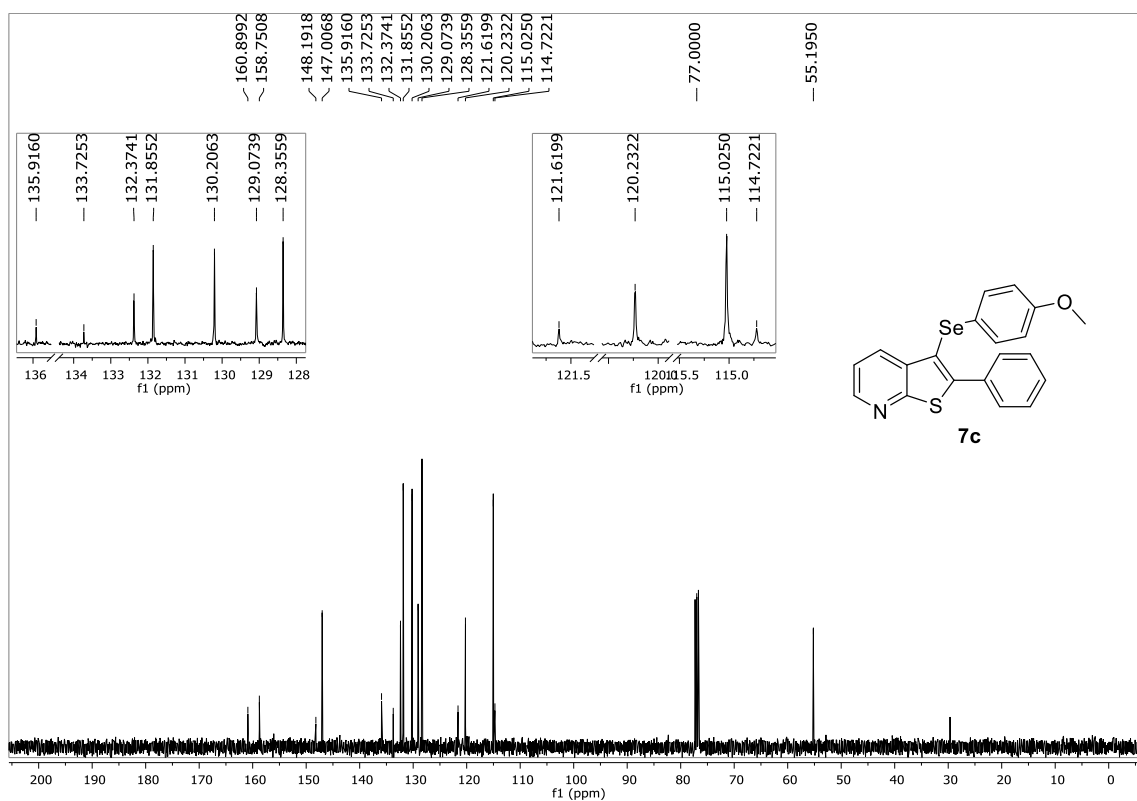


Figura 134. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **7c**.

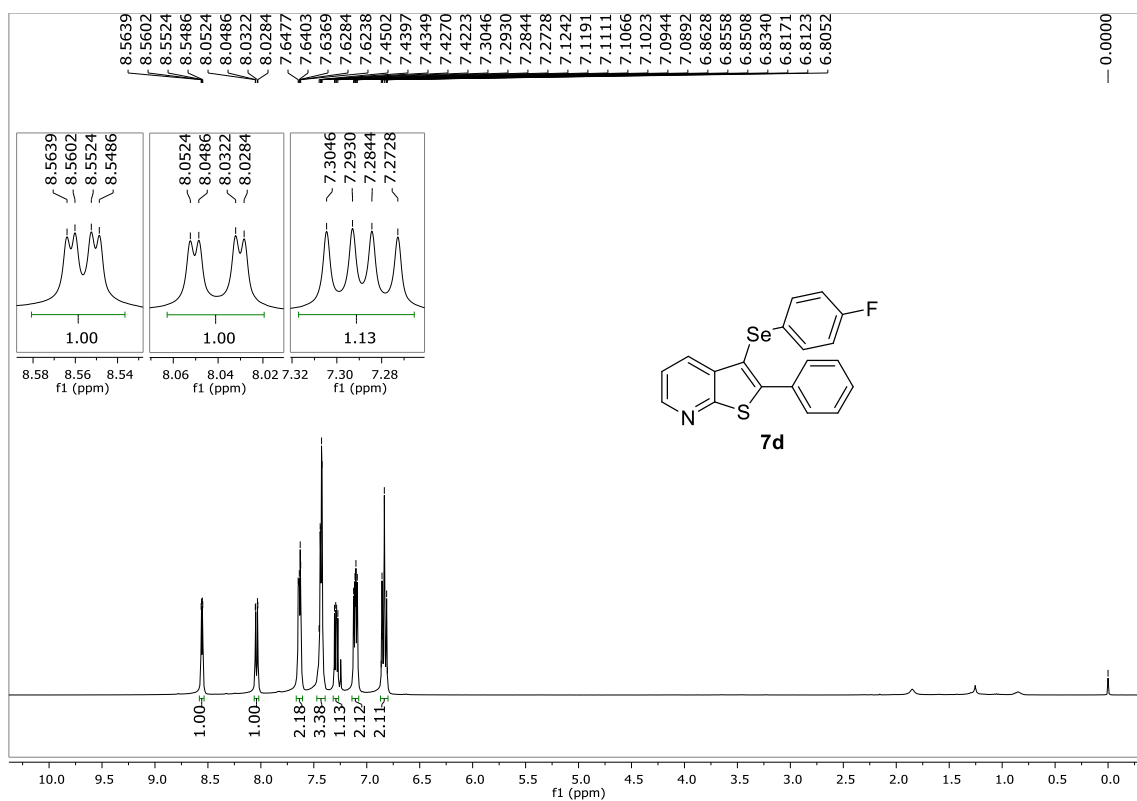


Figura 135. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 7d.

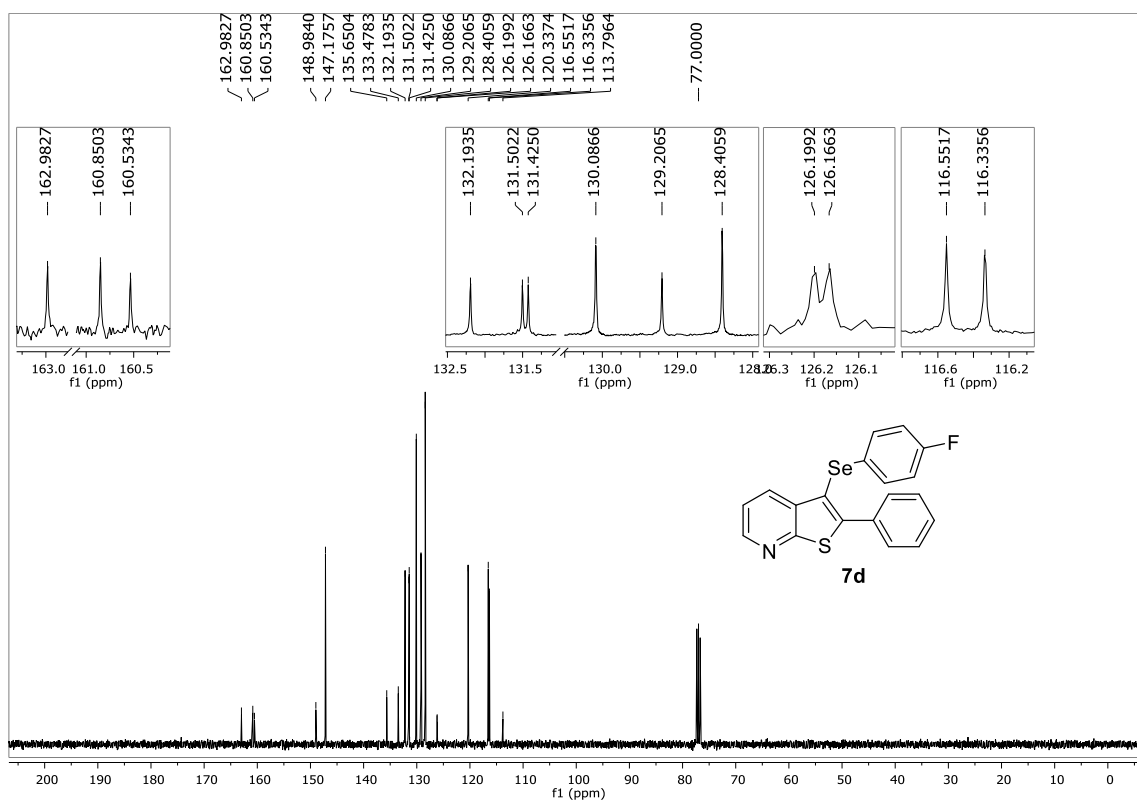


Figura 136. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 7d.

6. Espectros Seleccionados

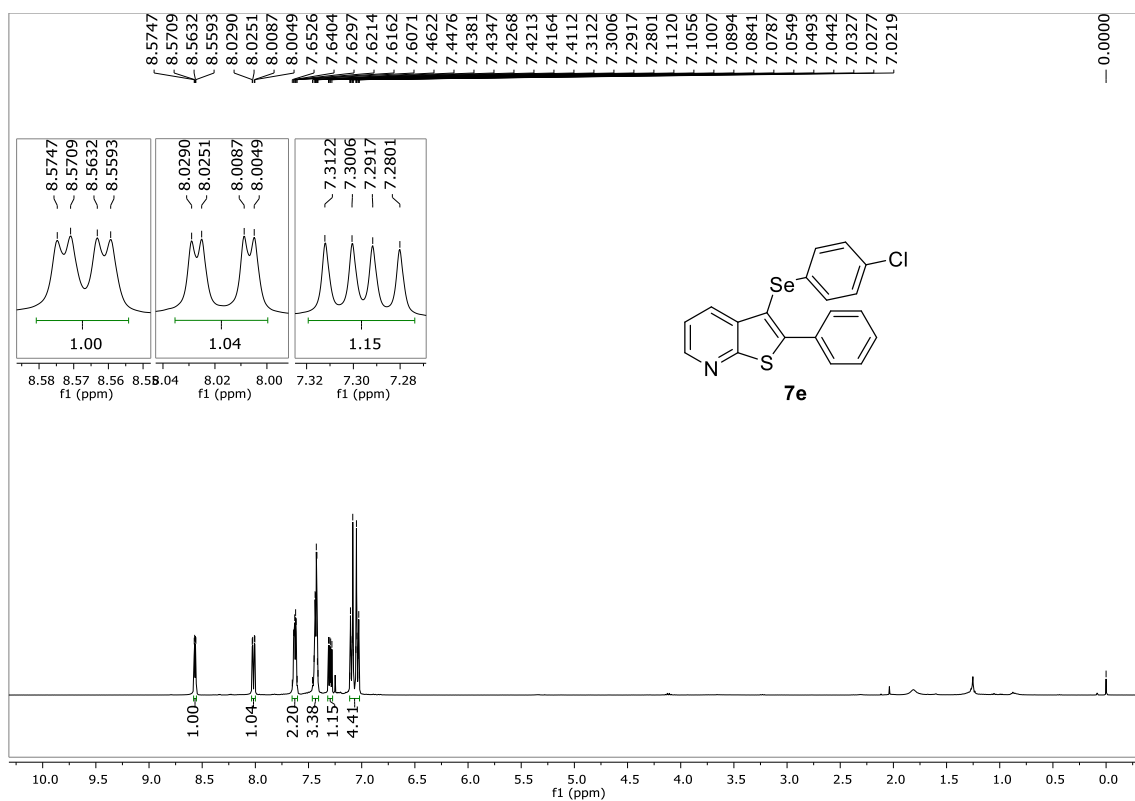


Figura 137. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 7e.

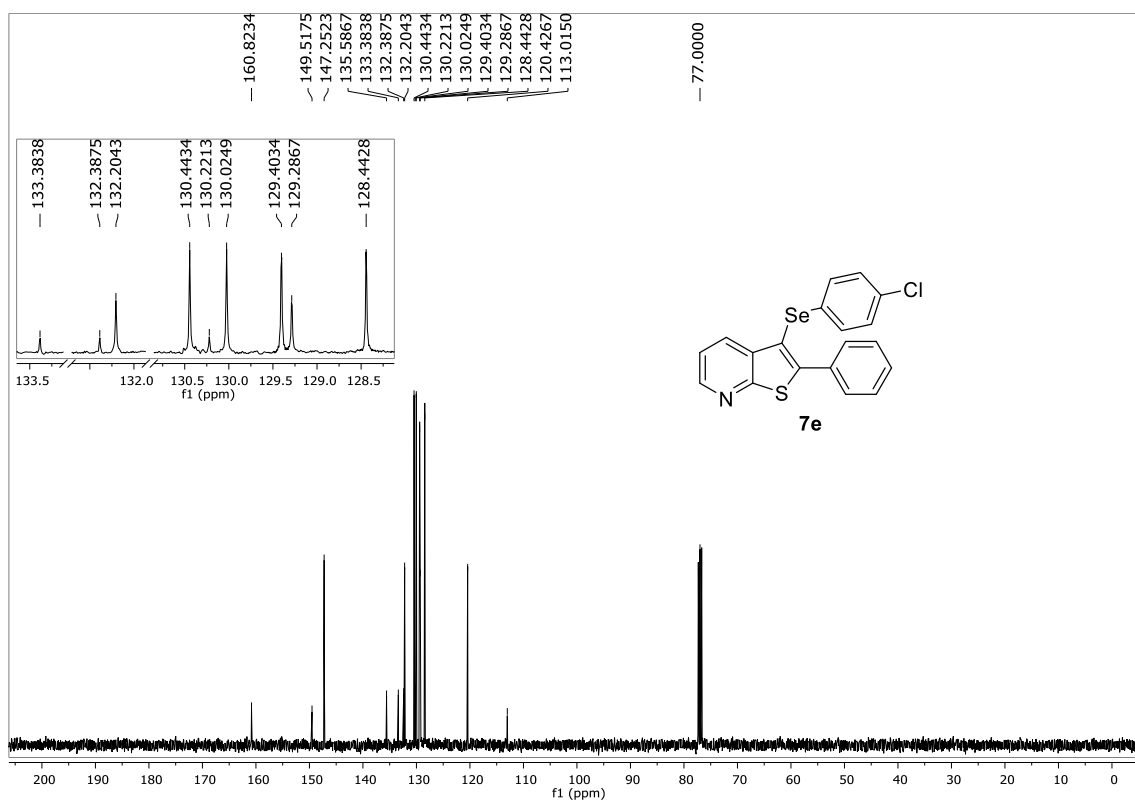


Figura 138. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 7e.

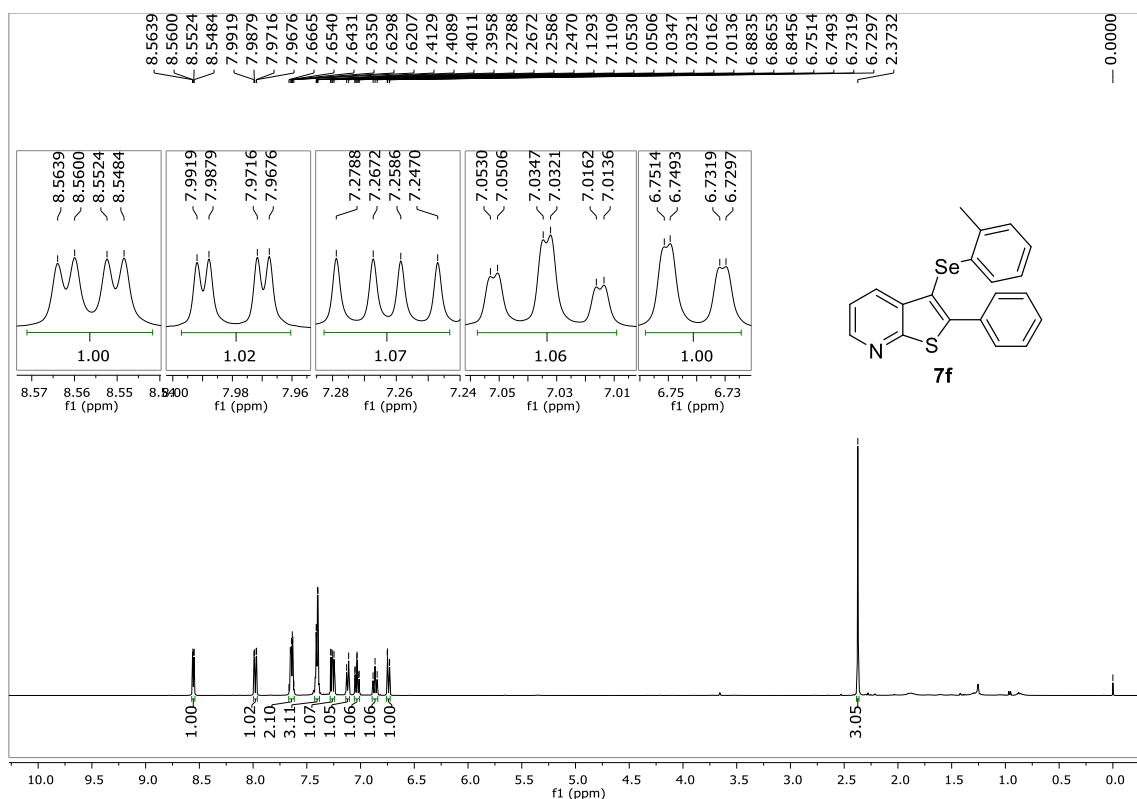


Figura 139. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **7f**.

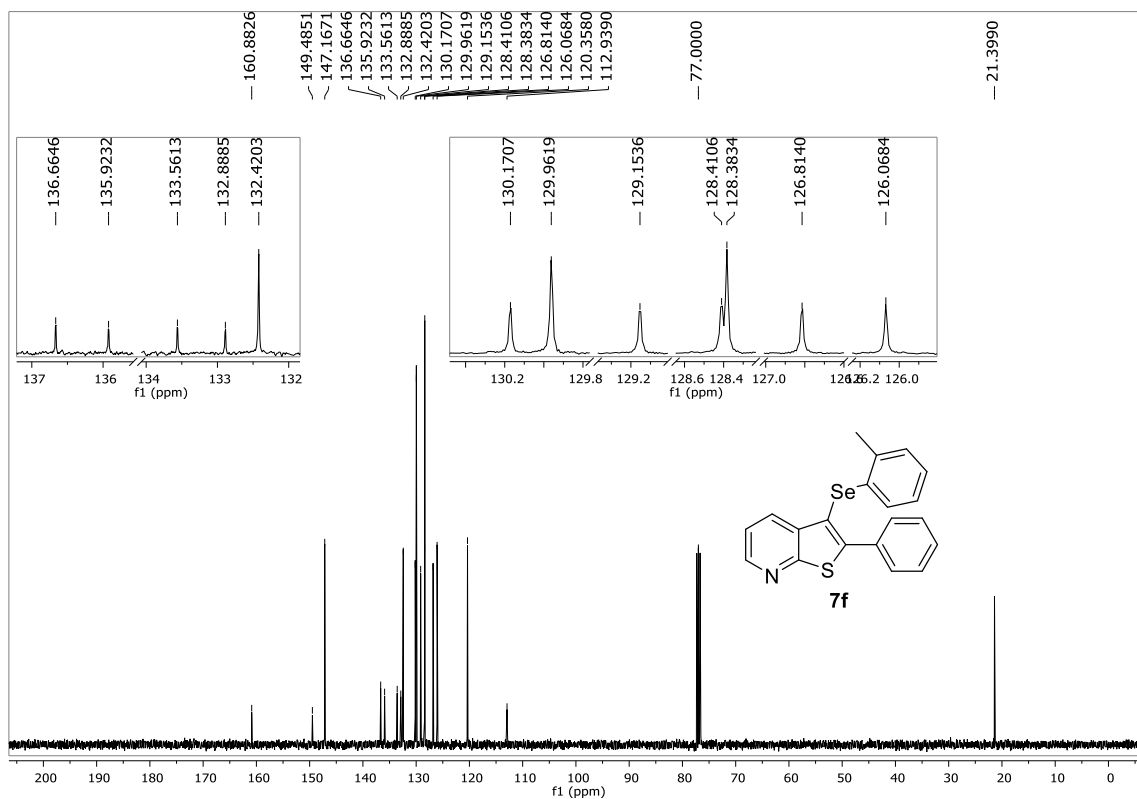


Figura 140. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **7f**.

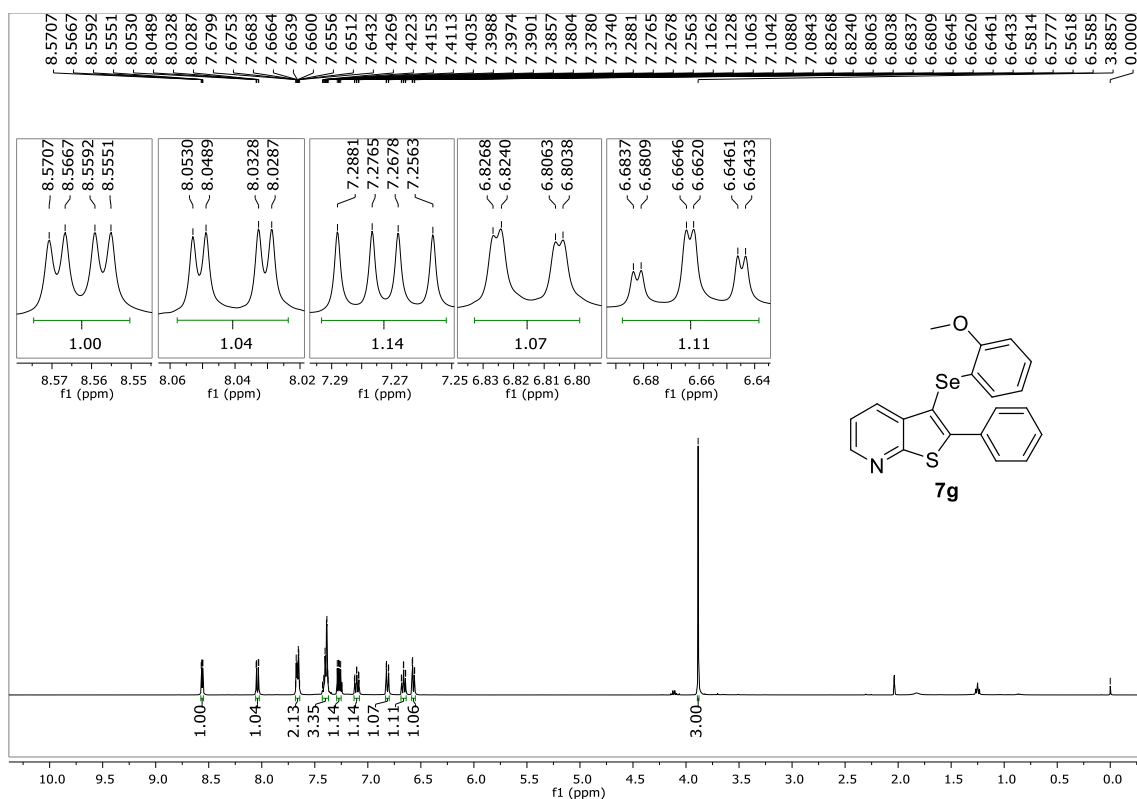


Figura 141. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 7g.

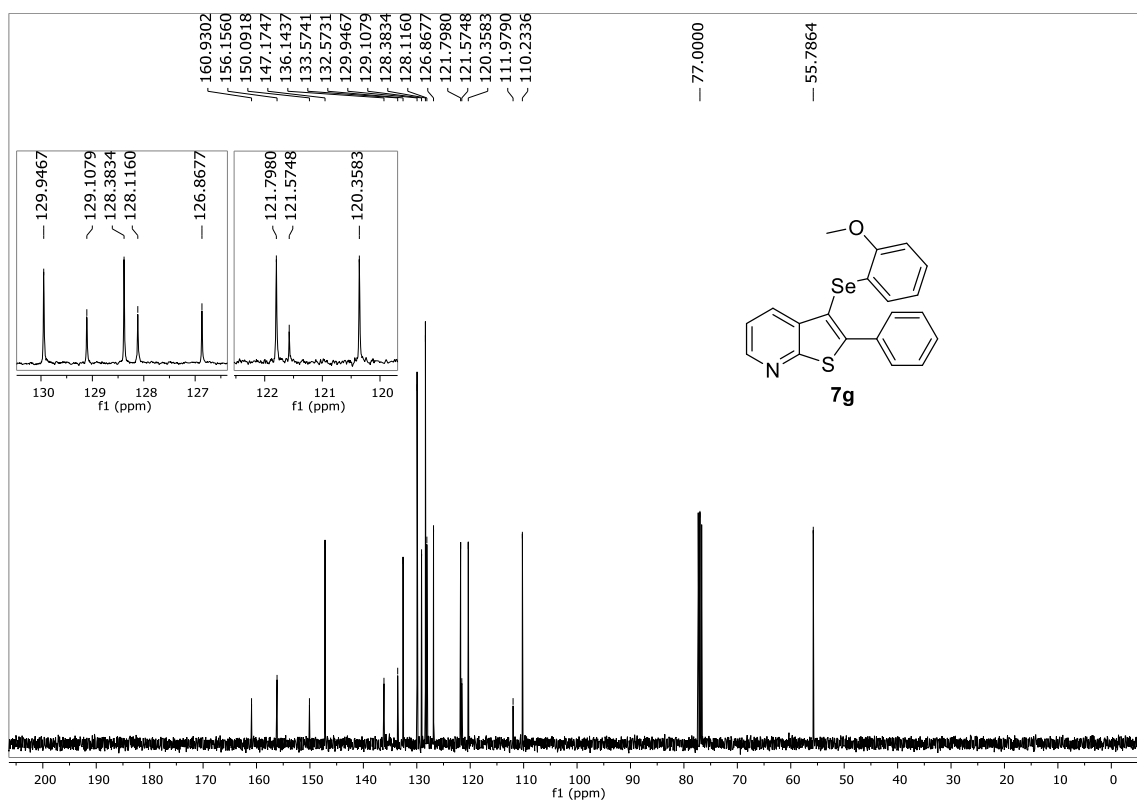


Figura 142. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 7g.

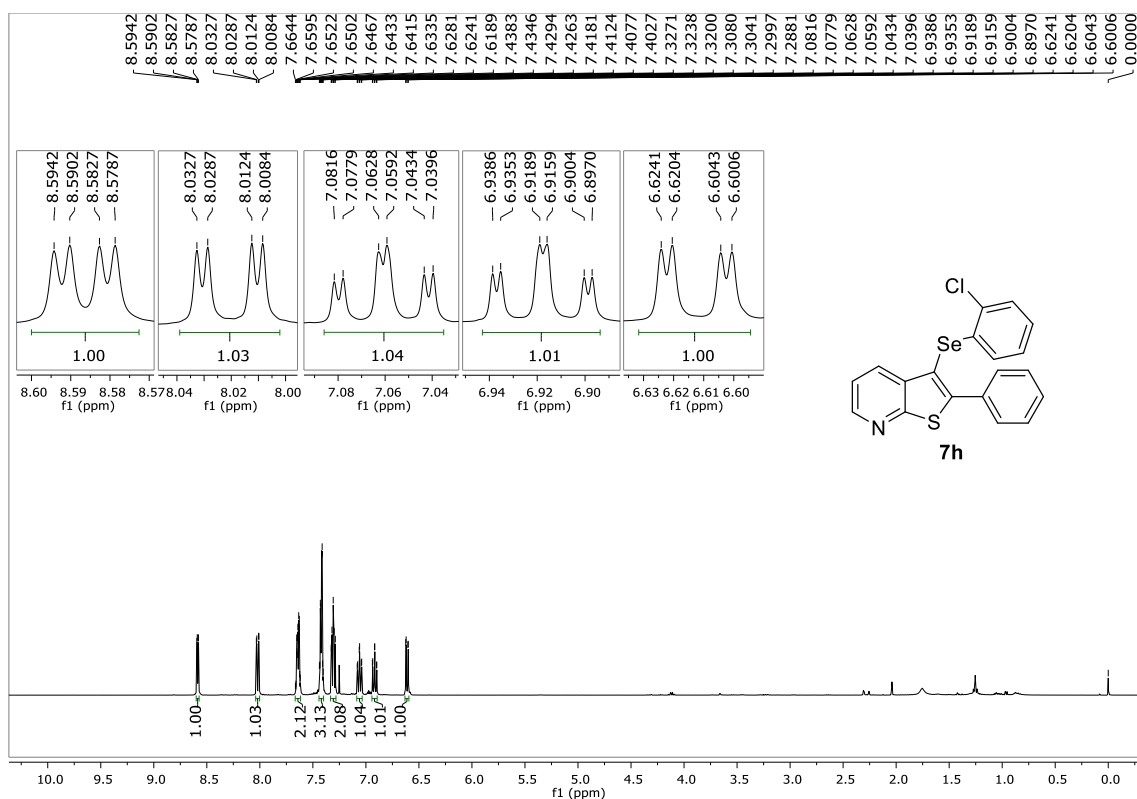


Figura 143. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 7h.

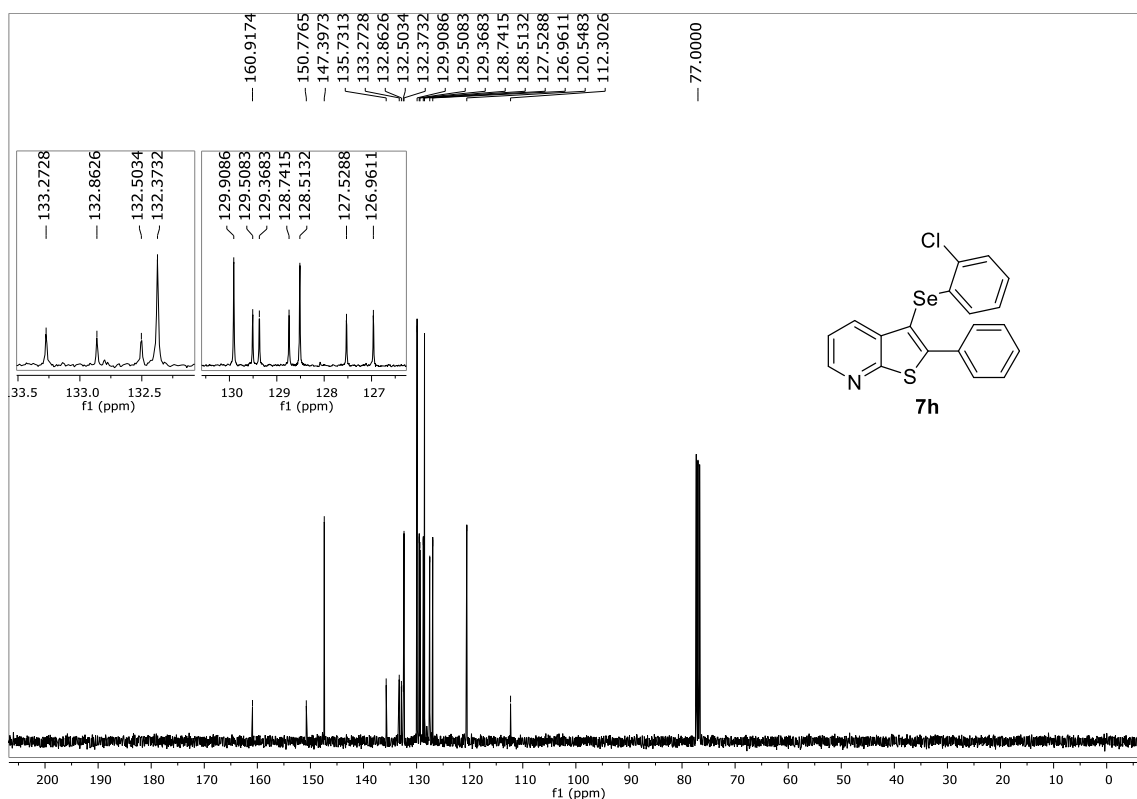


Figura 144. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 7h.

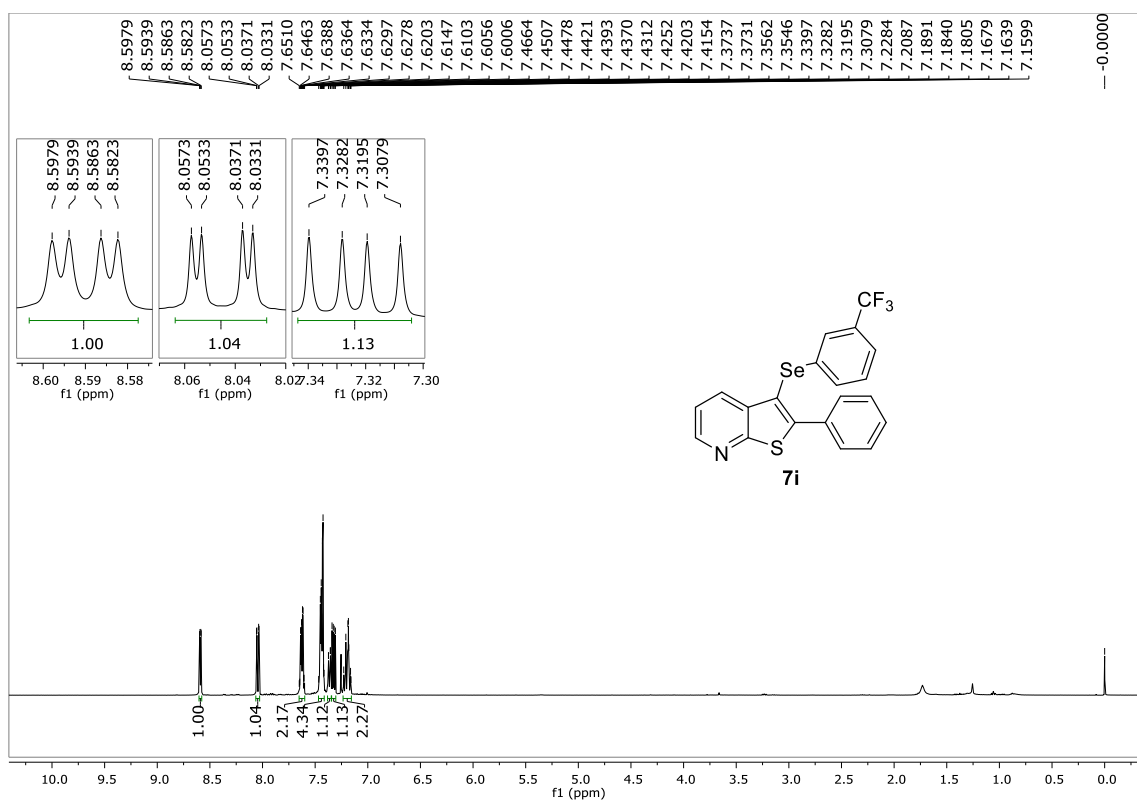


Figura 145. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **7i**.

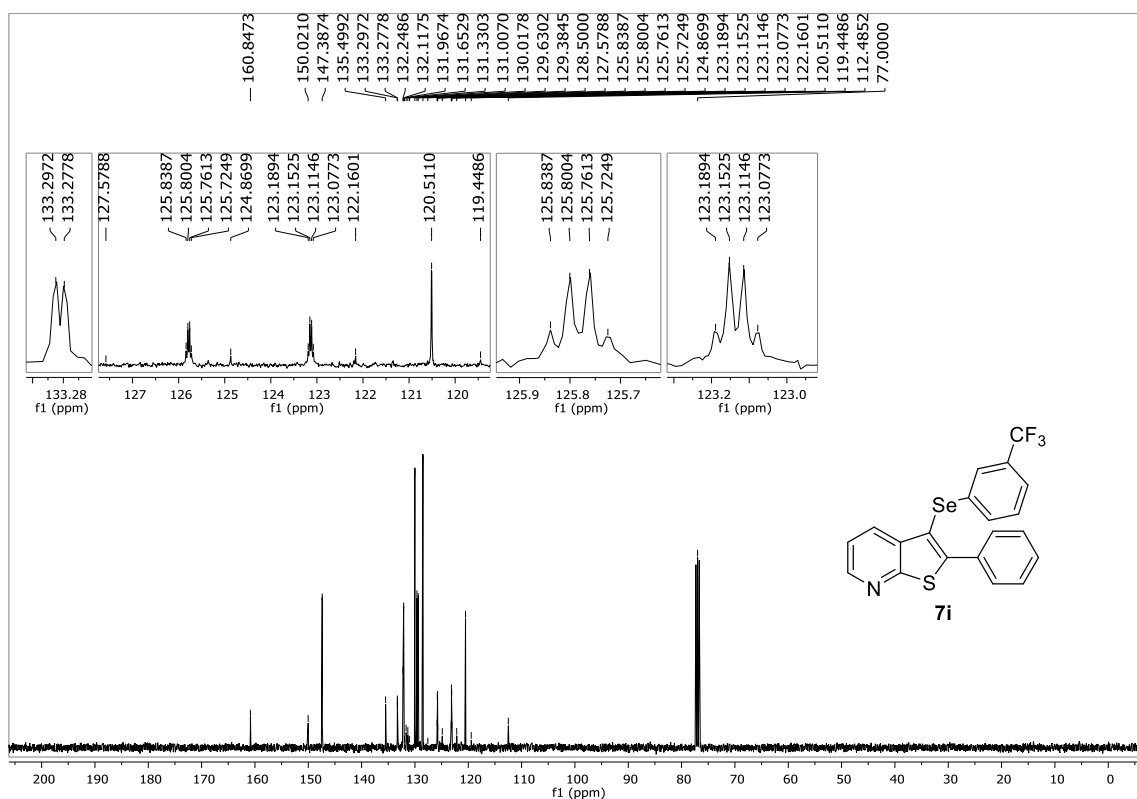


Figura 146. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **7i**.

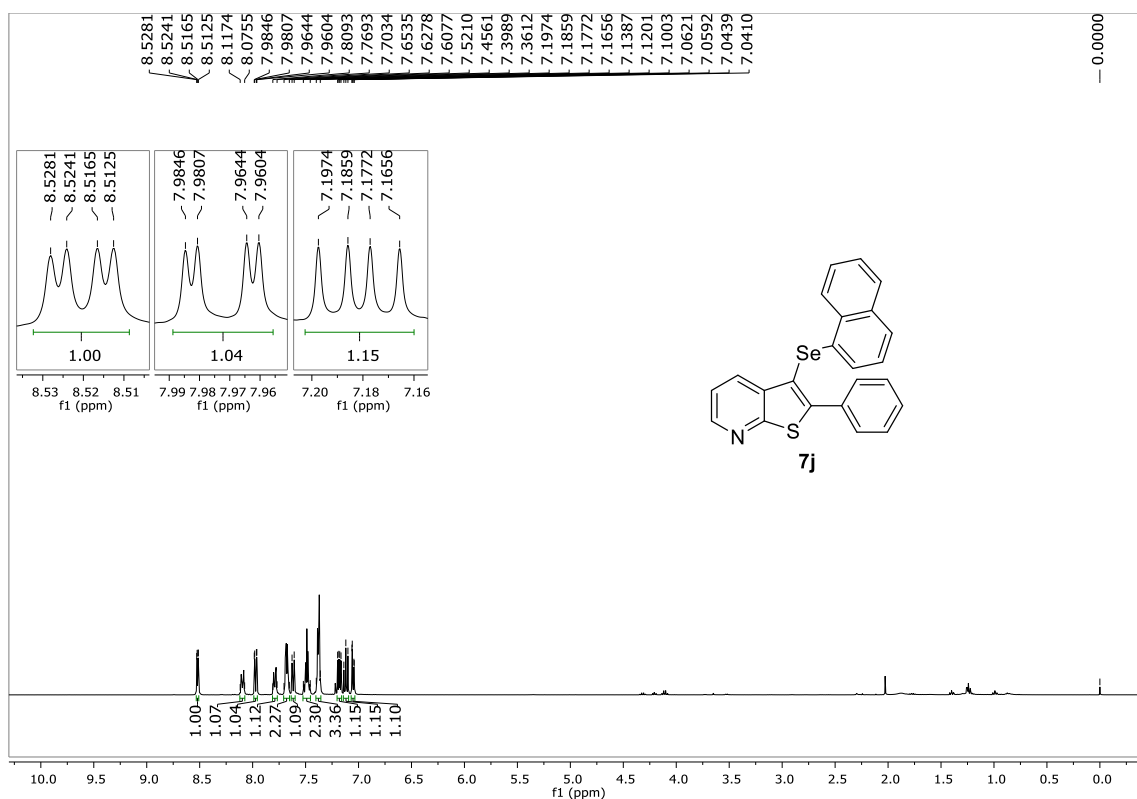


Figura 147. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 7j.

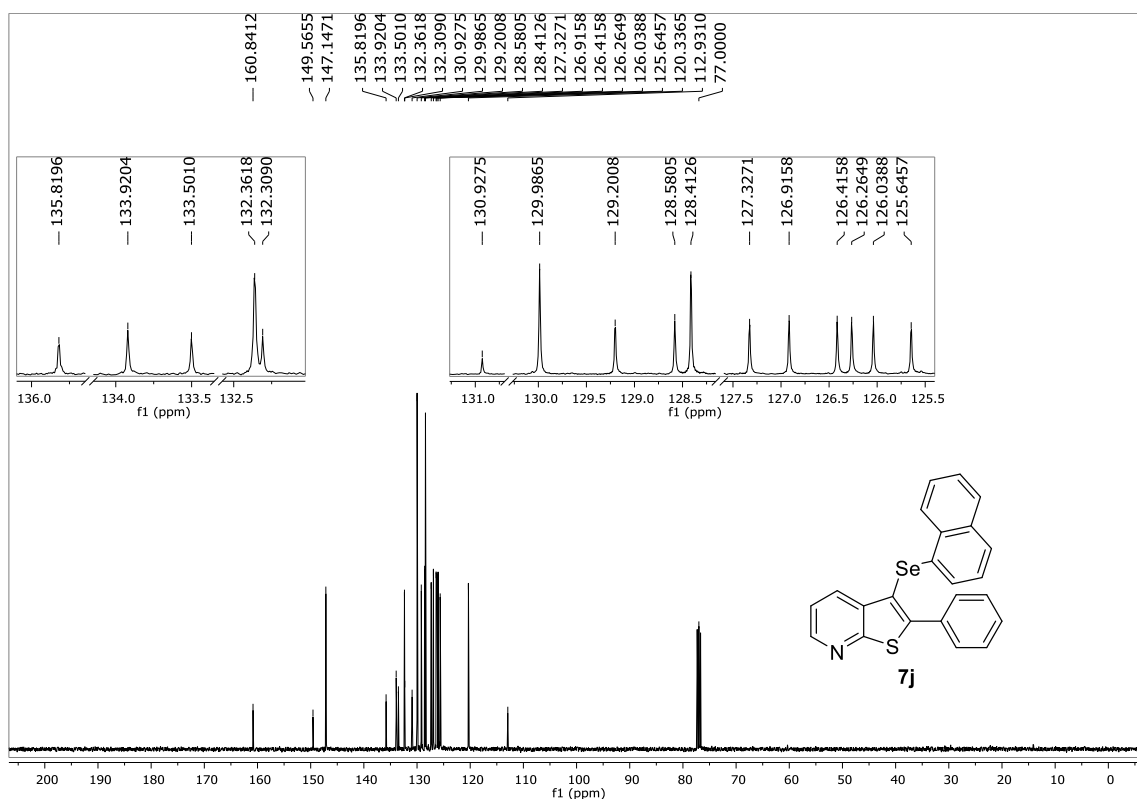


Figura 148. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 7j.

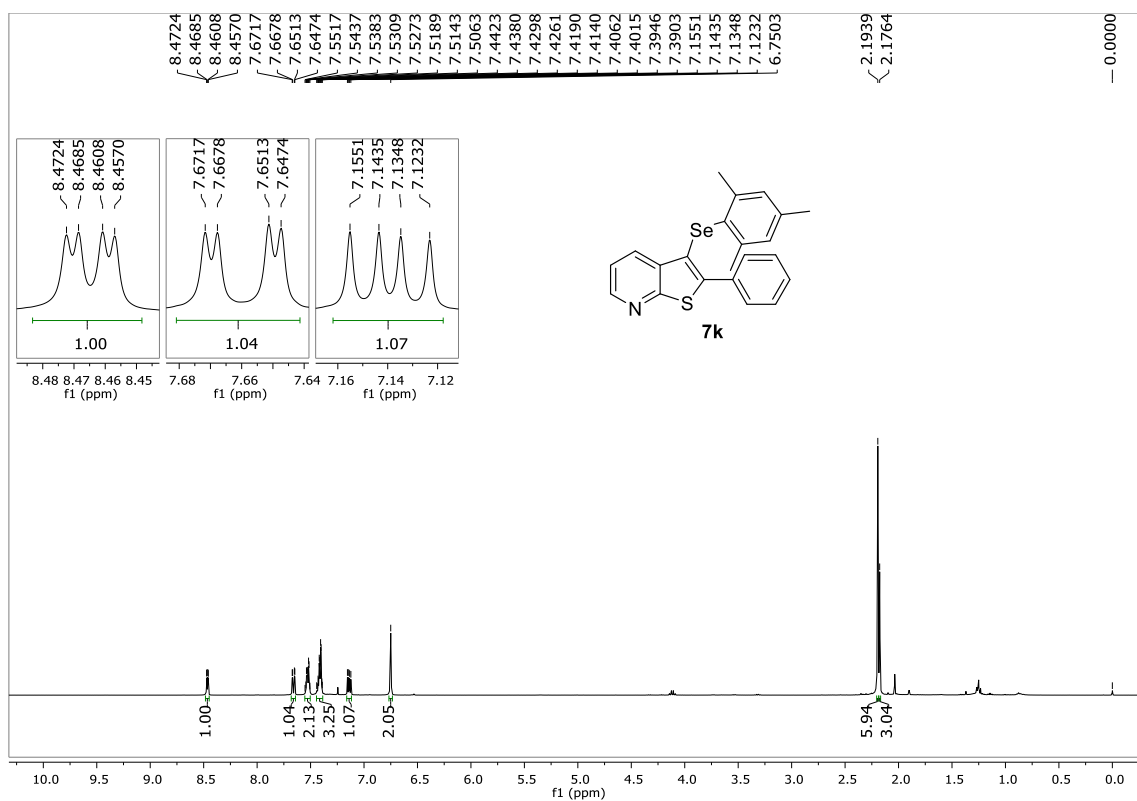


Figura 149. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 7k.

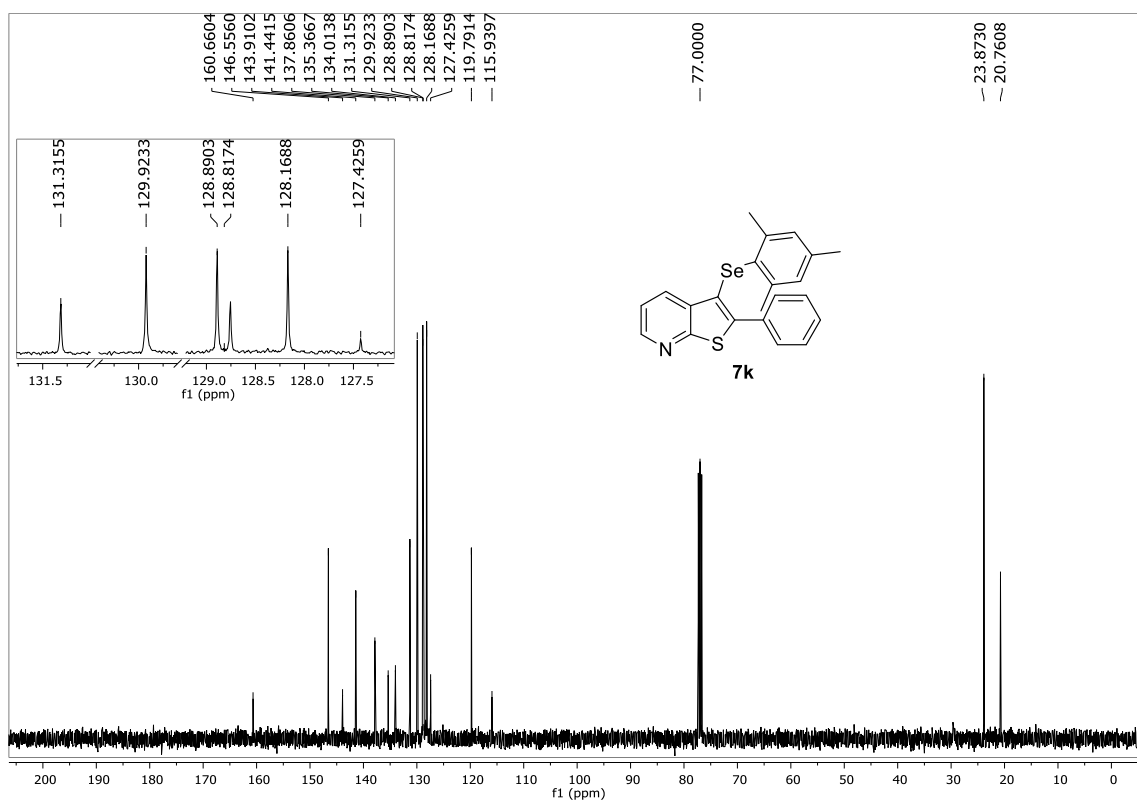


Figura 150. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 7k.

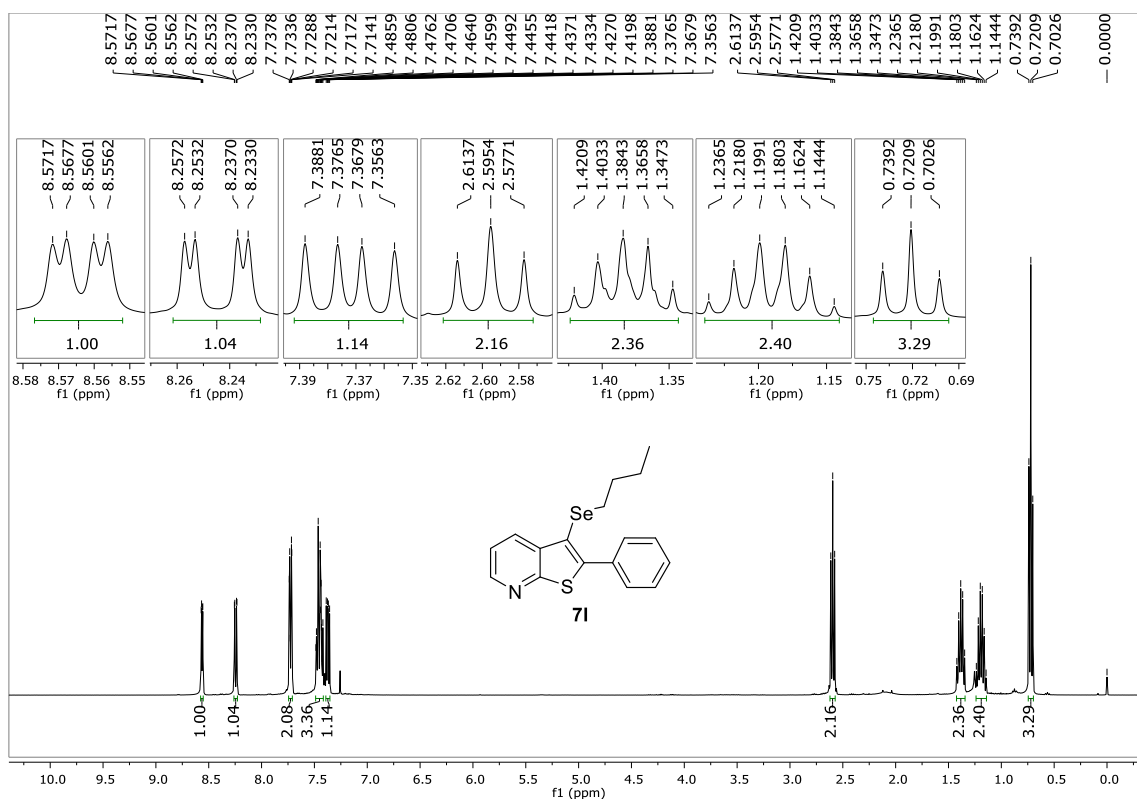


Figura 151. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto 7I.

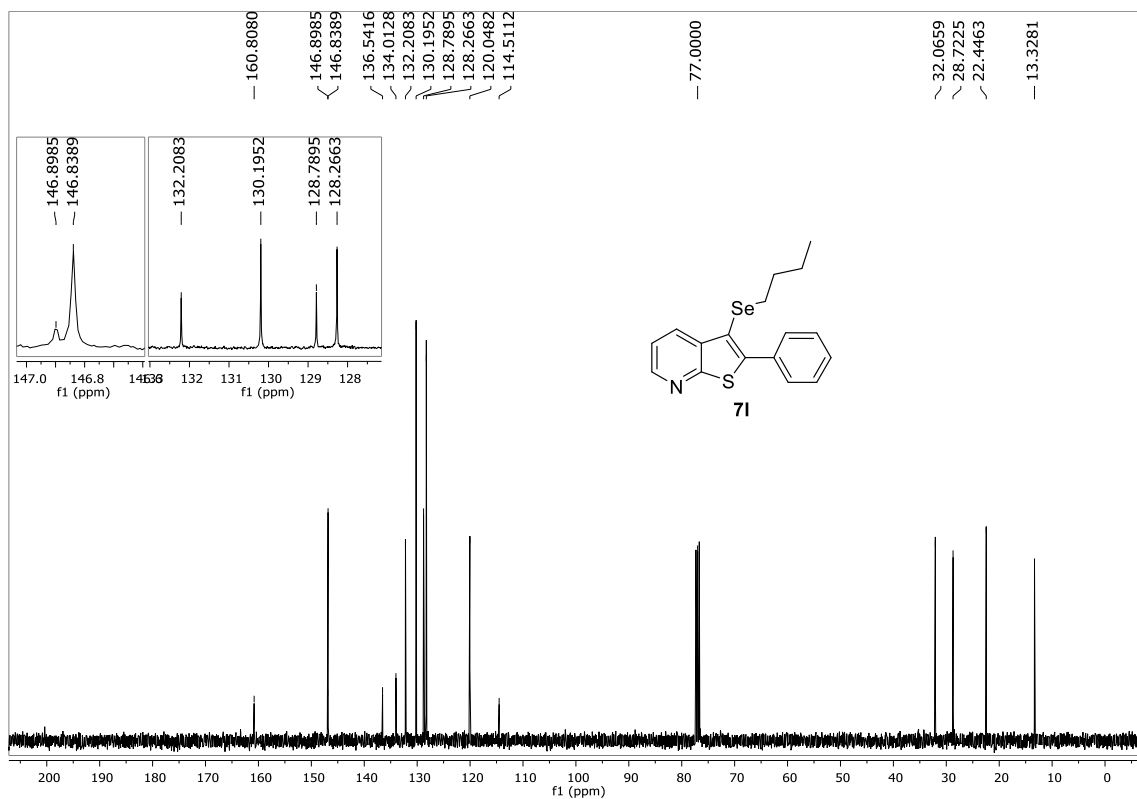


Figura 152. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto 7I.

6. Espectros Seleccionados

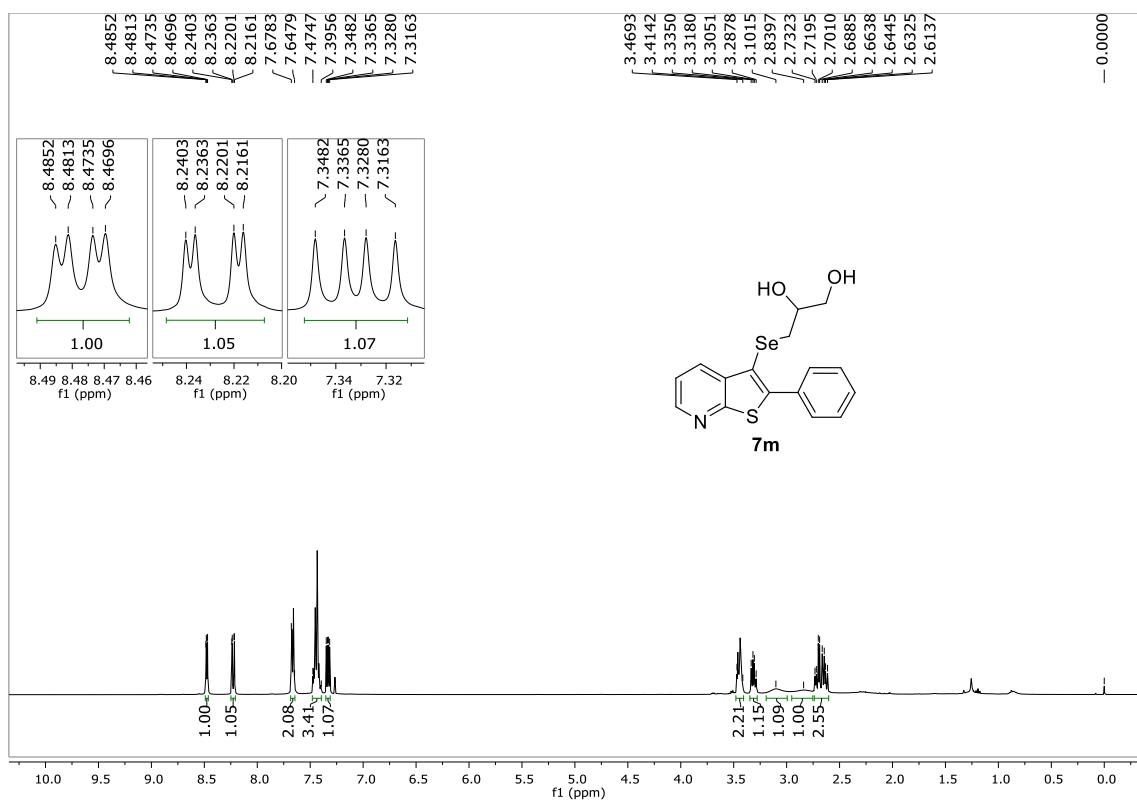


Figura 153. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **7m**.

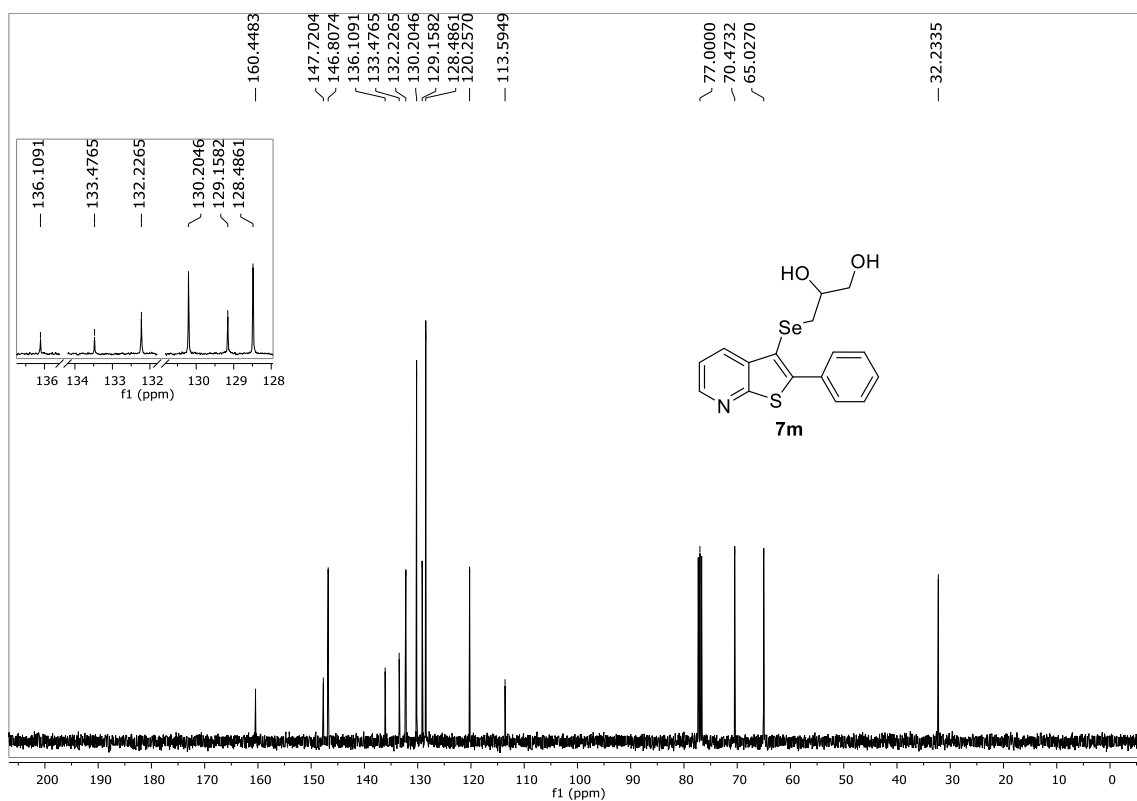


Figura 154. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **7m**.

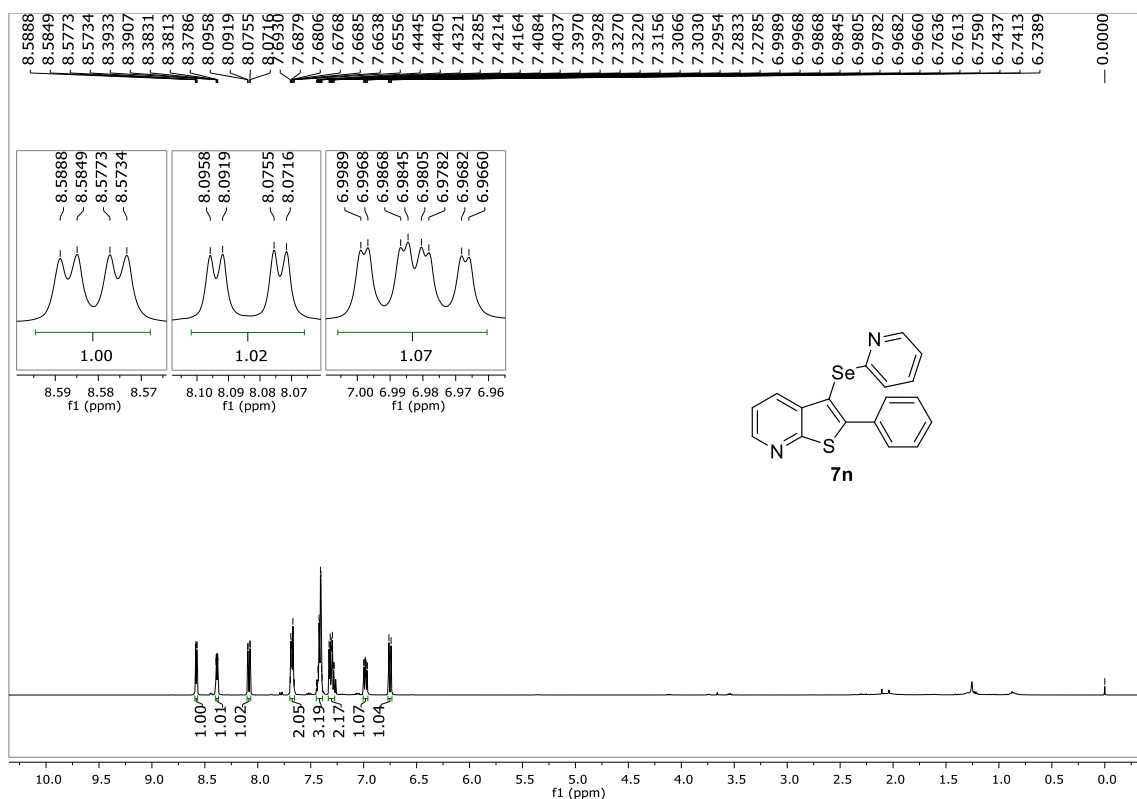


Figura 155. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **7n**.

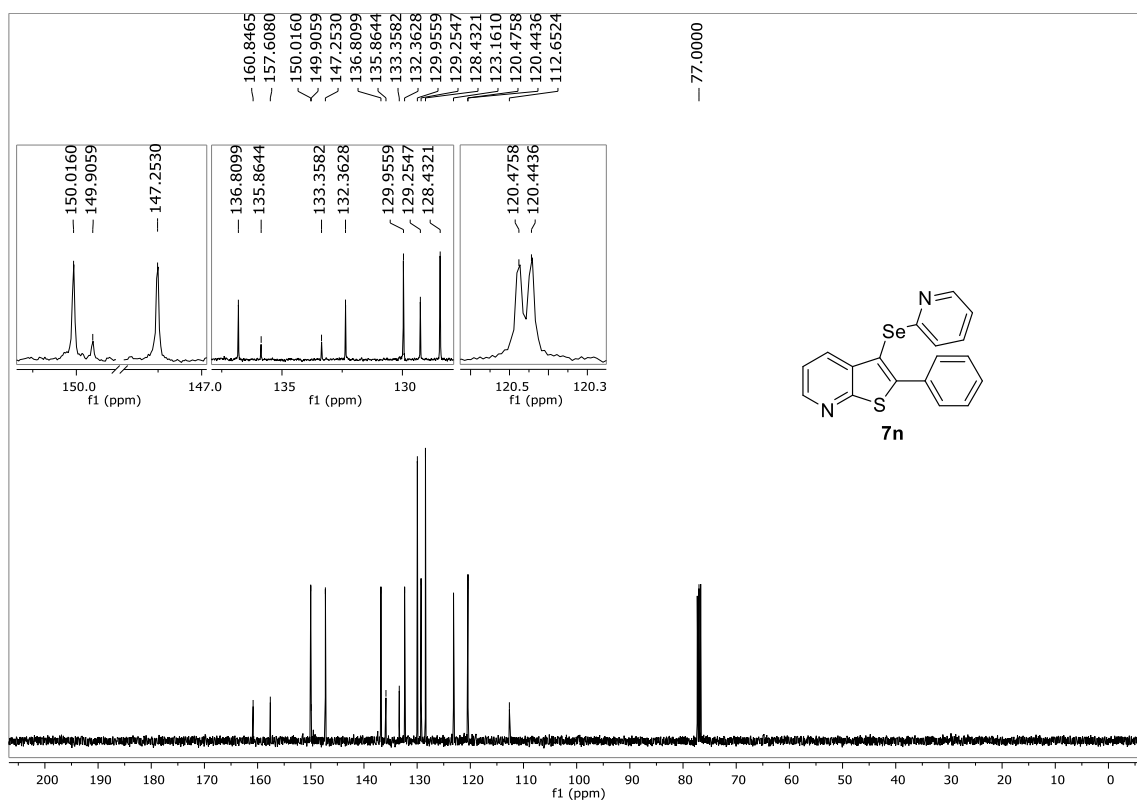


Figura 156. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **7n**.

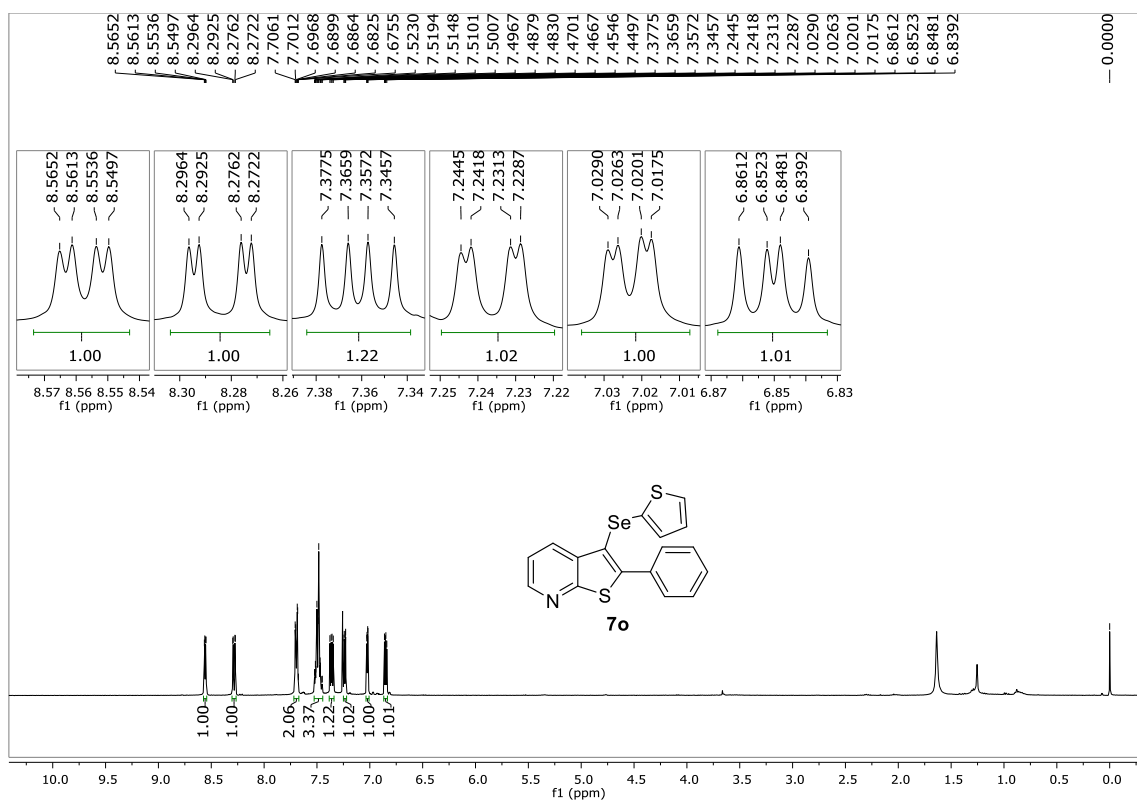


Figura 157. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **7o**.

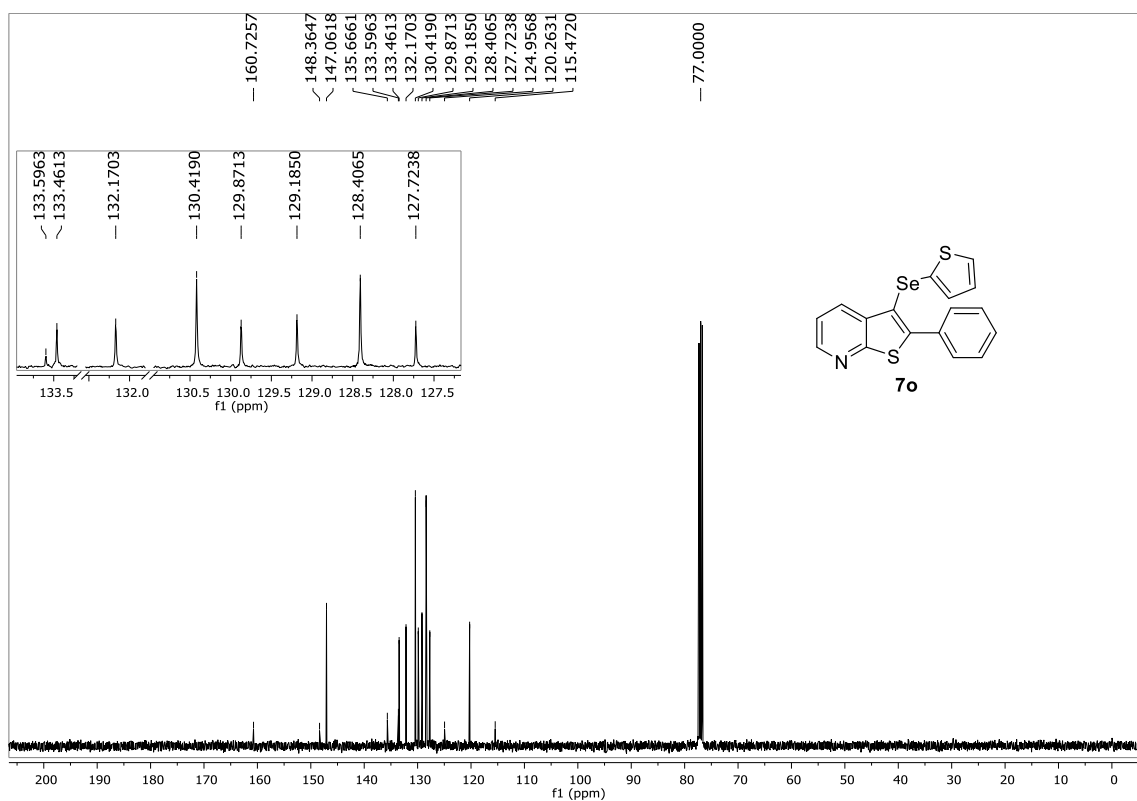


Figura 158. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **7o**.

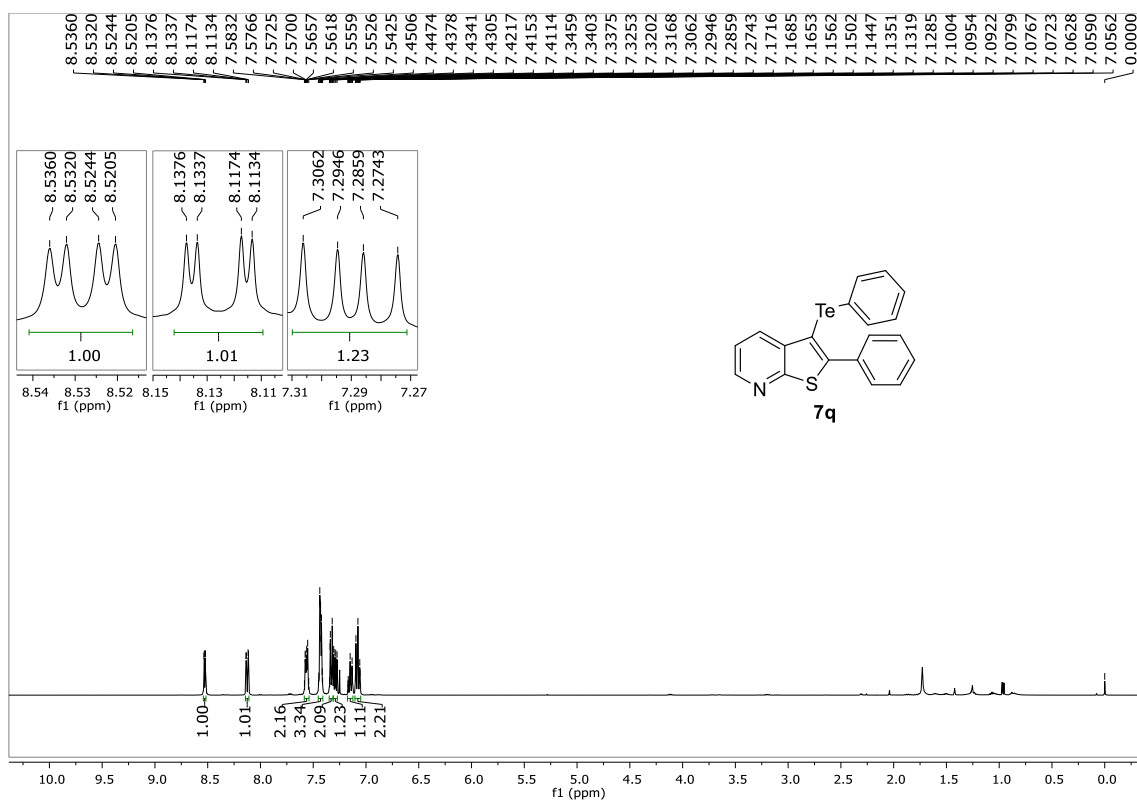


Figura 159. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **7q**.

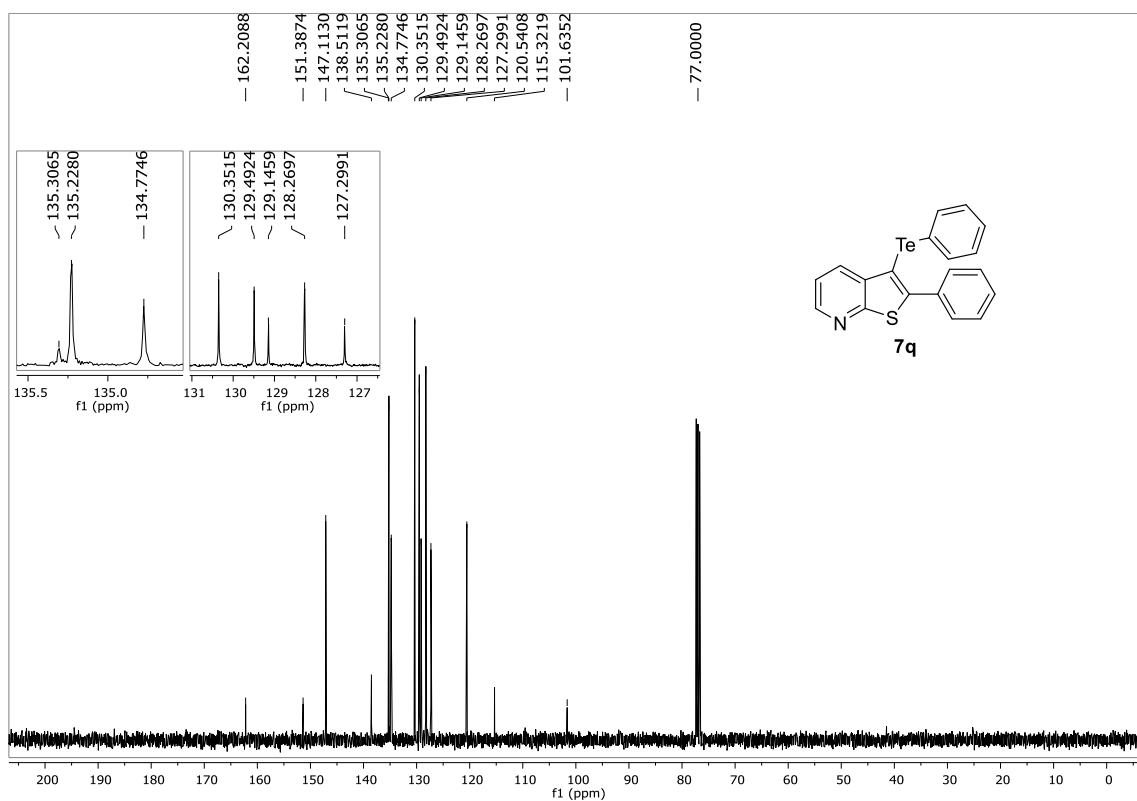


Figura 160. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **7q**.

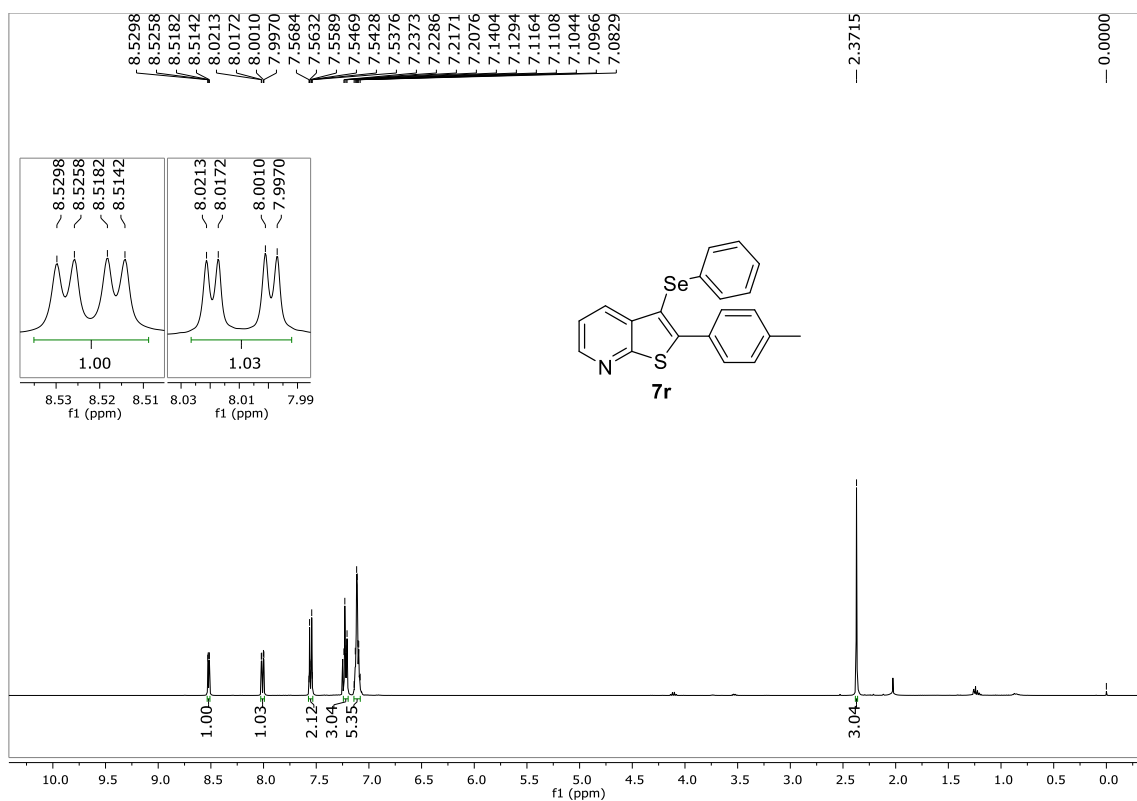


Figura 161. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto 7r.

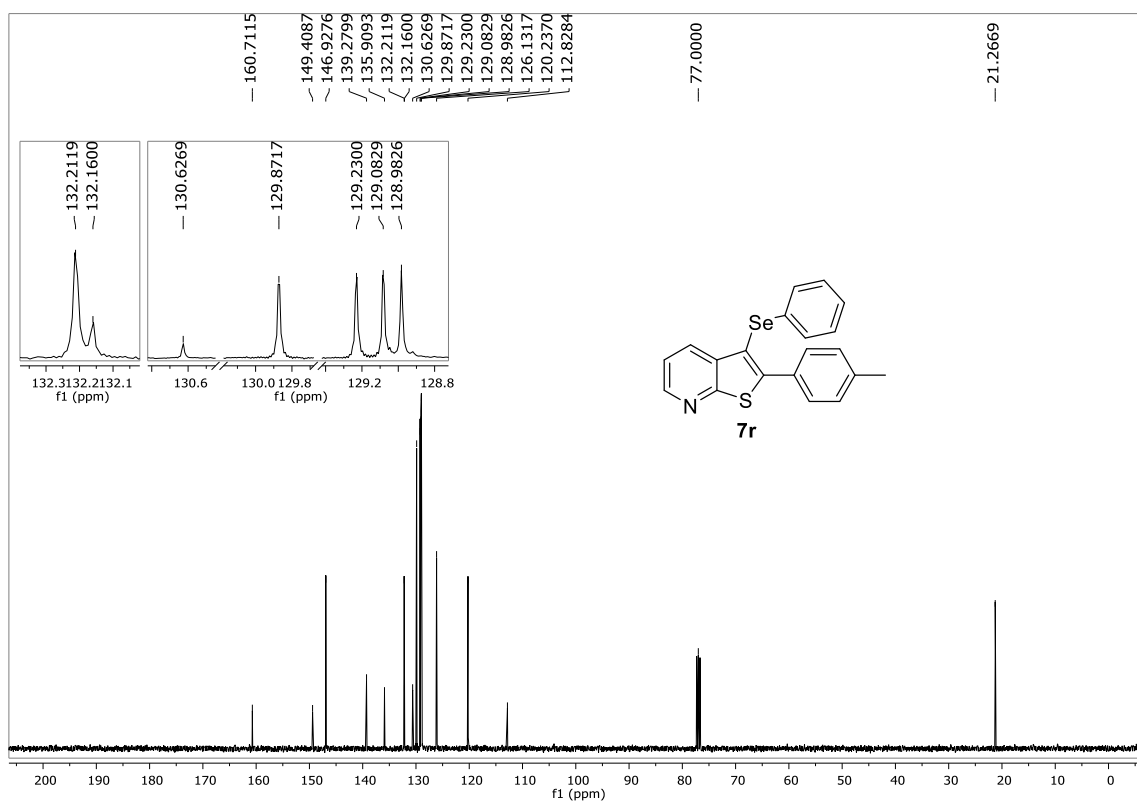


Figura 162. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto 7r.

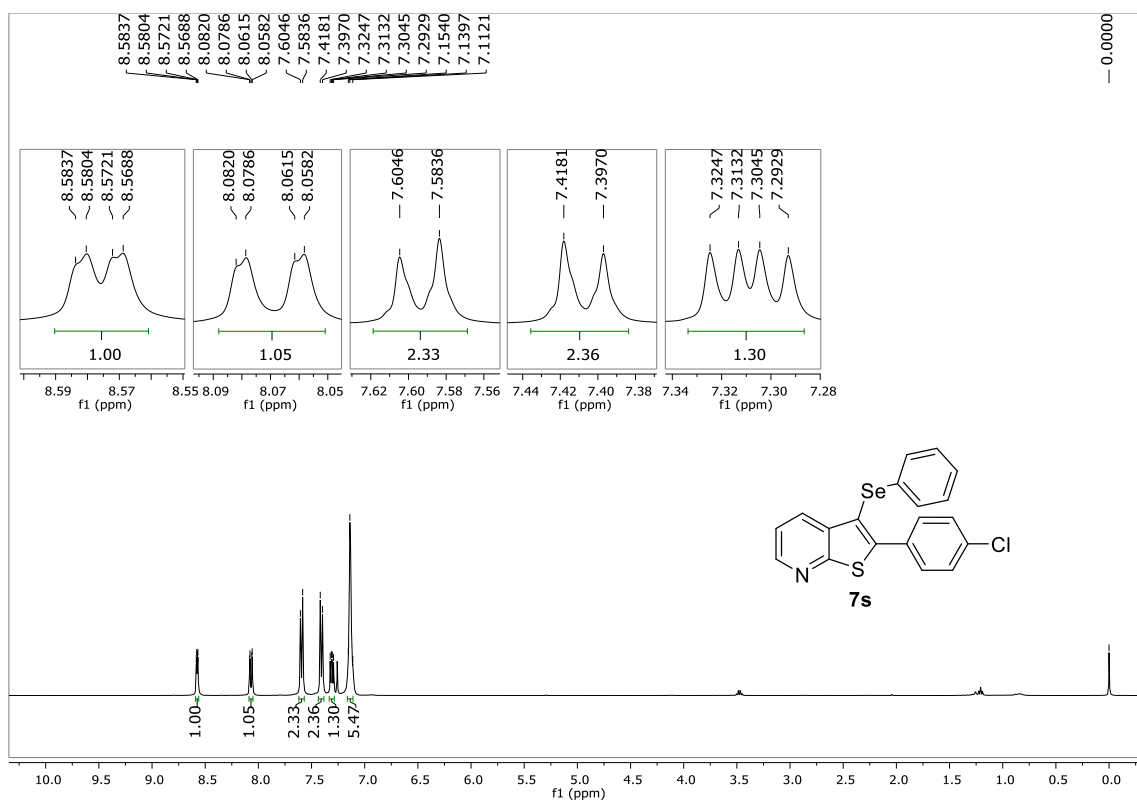


Figura 163. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **7s**.

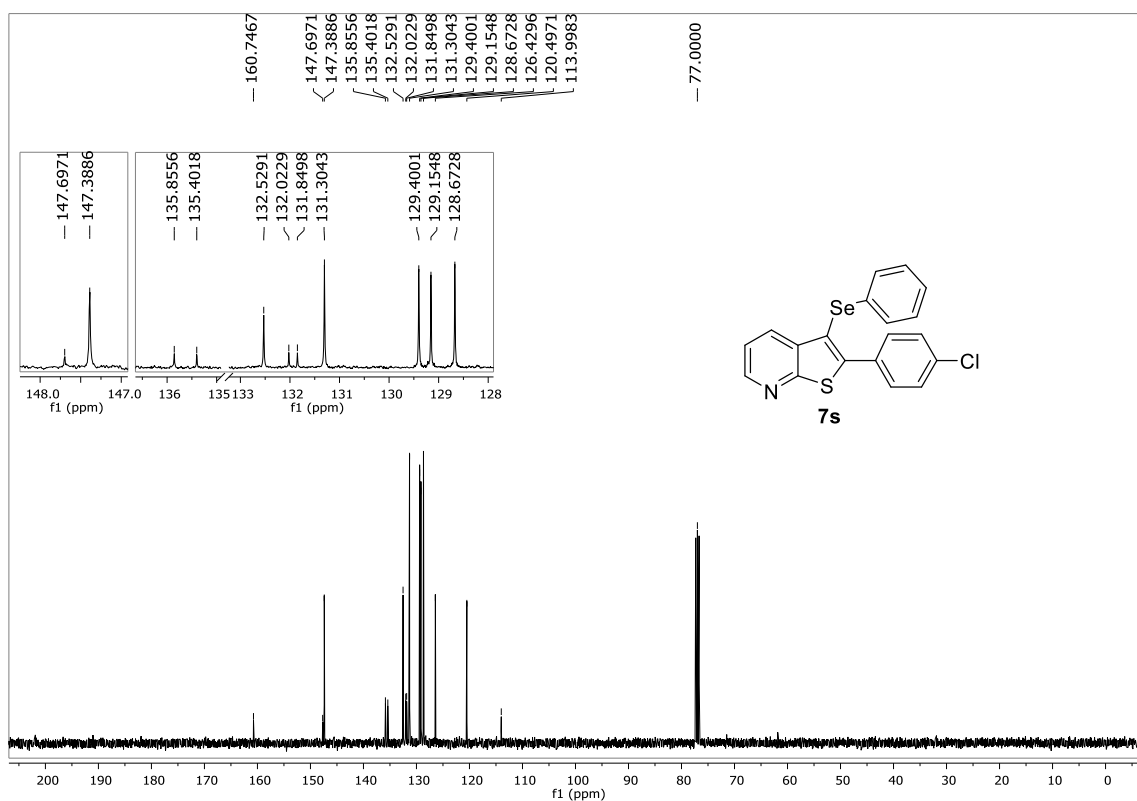


Figura 164. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **7s**.

6. Espectros Seleccionados

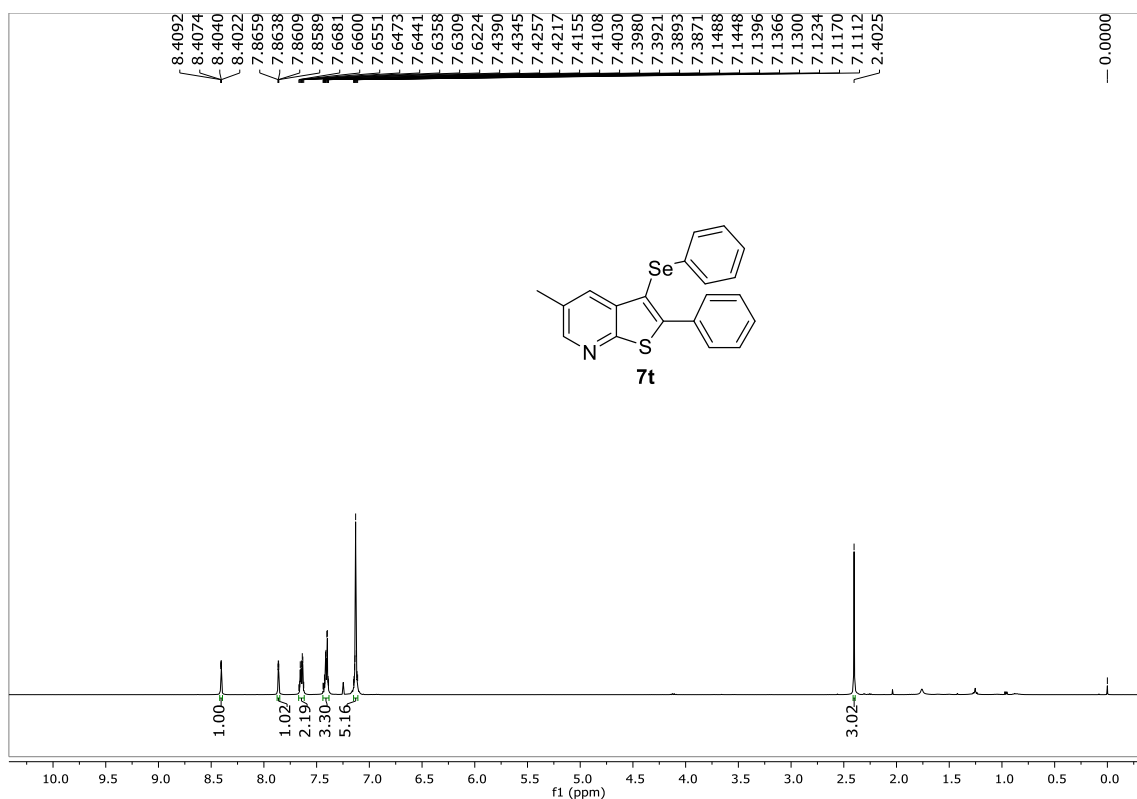


Figura 165. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 7t.

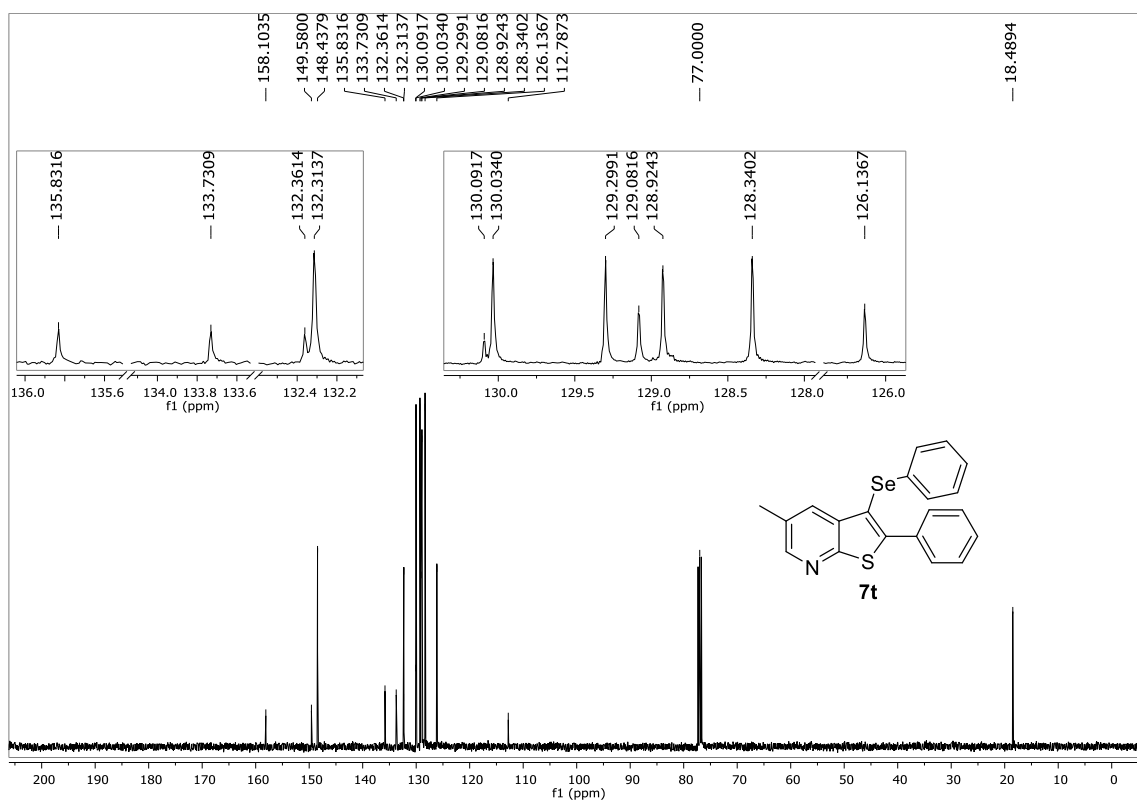


Figura 166. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 7t.

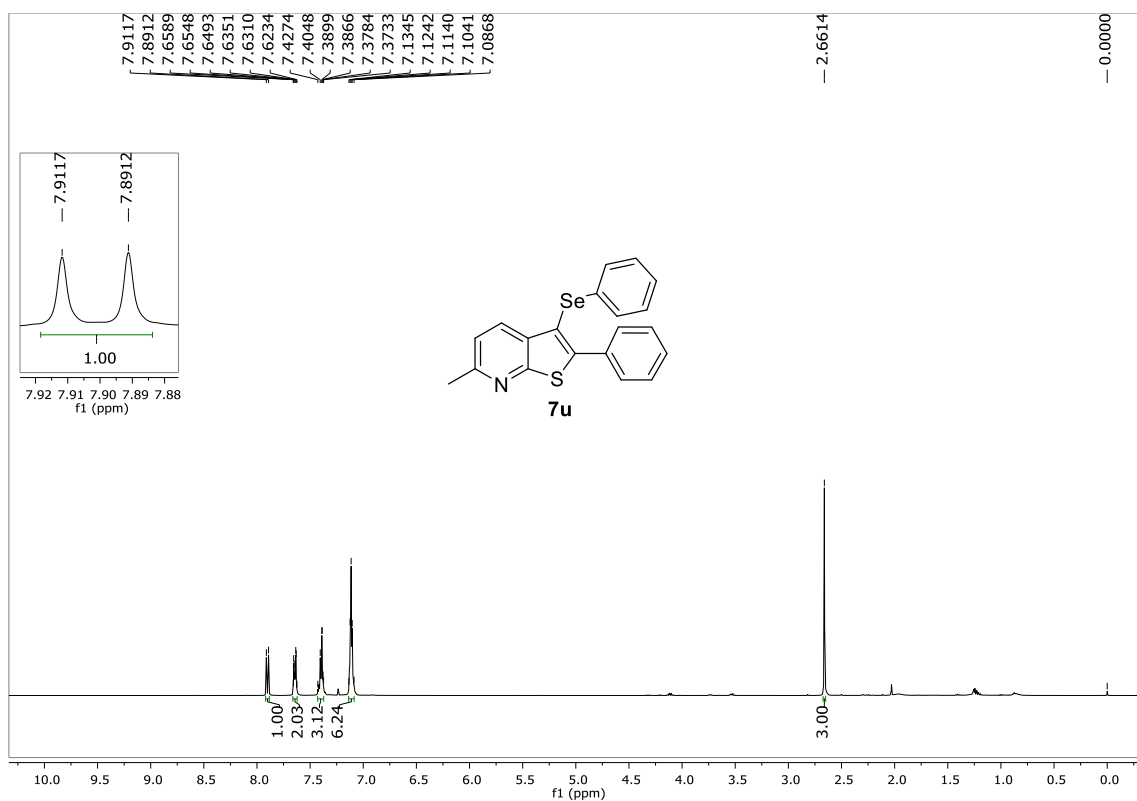


Figura 167. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **7u**.

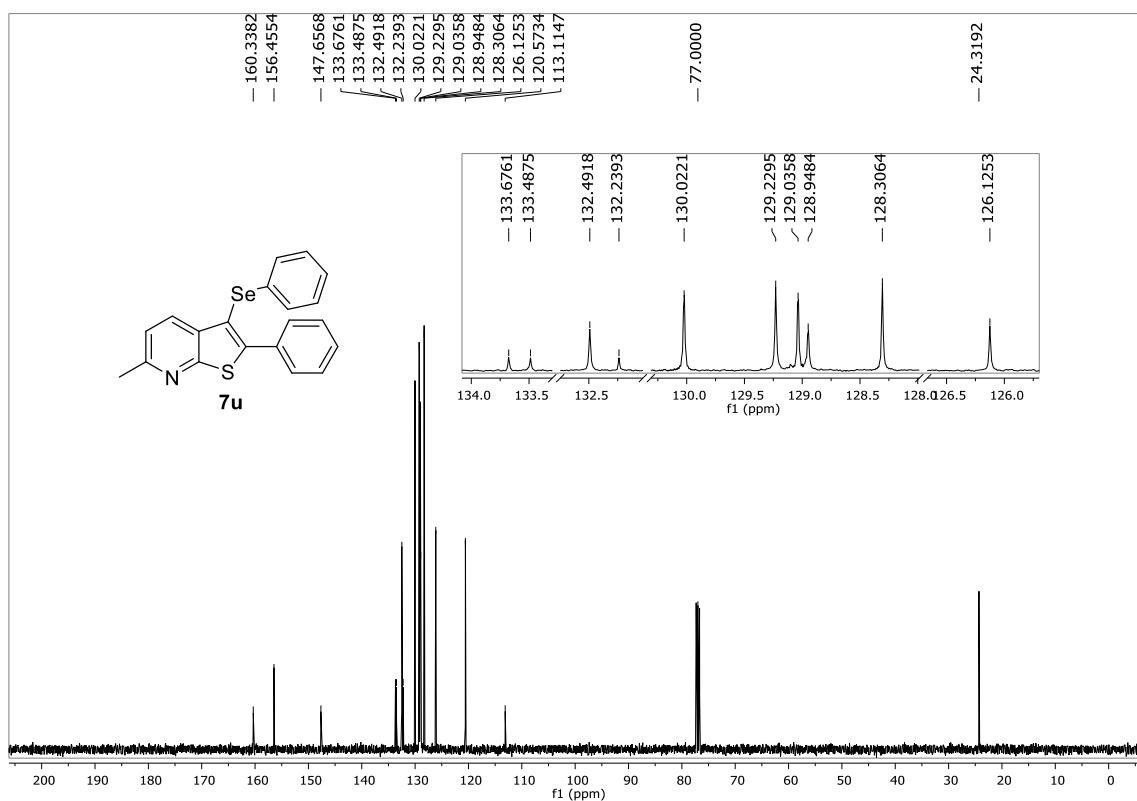


Figura 168. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **7u**.

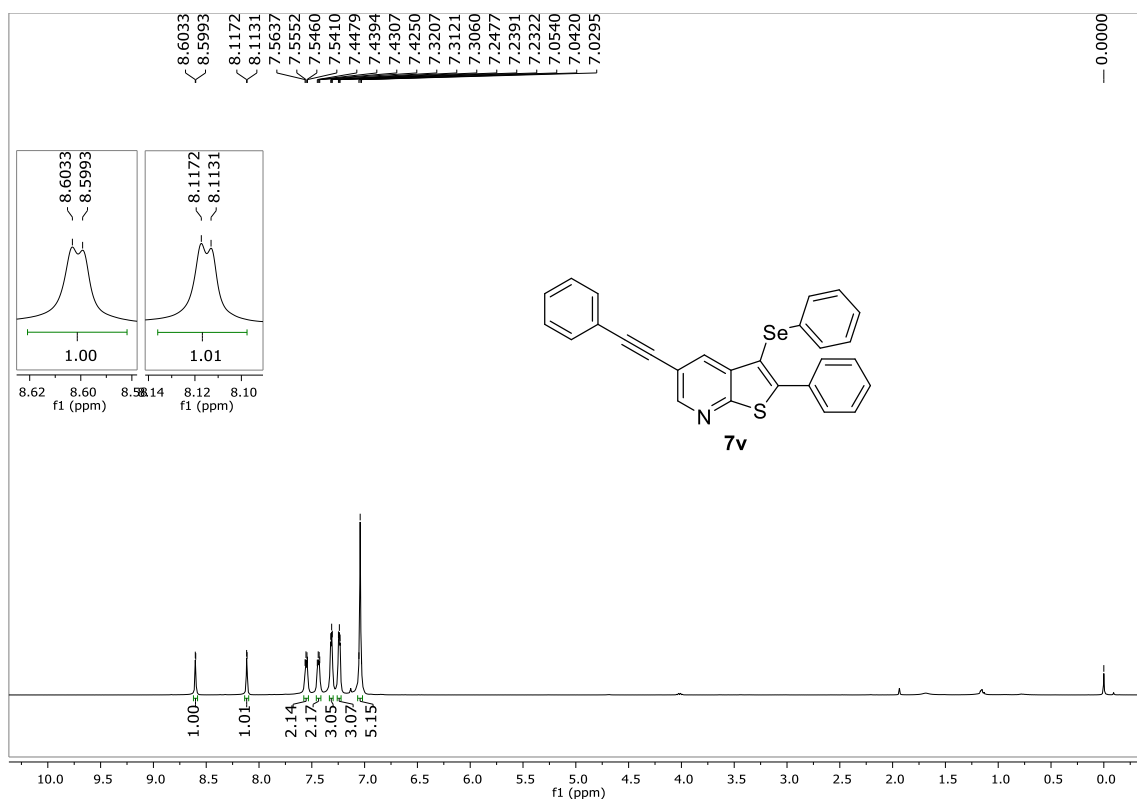


Figura 169. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto 7v.

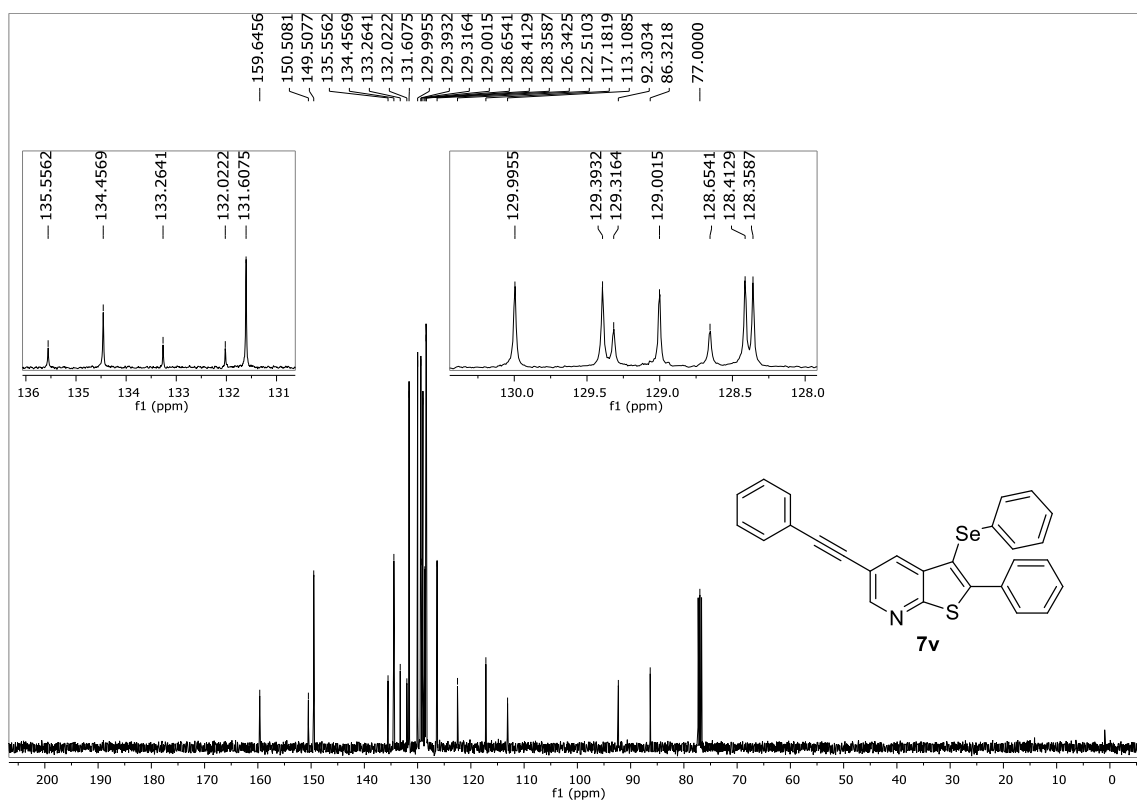


Figura 170. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto 7v.

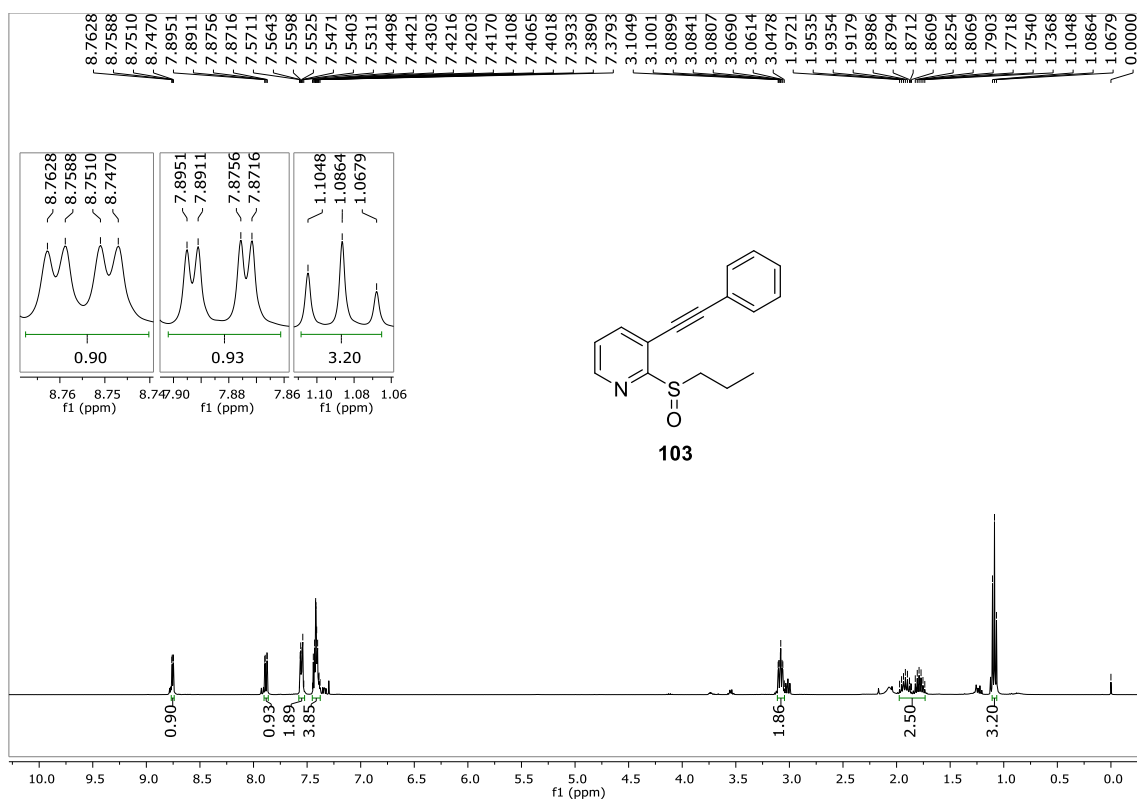


Figura 171. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **103**.

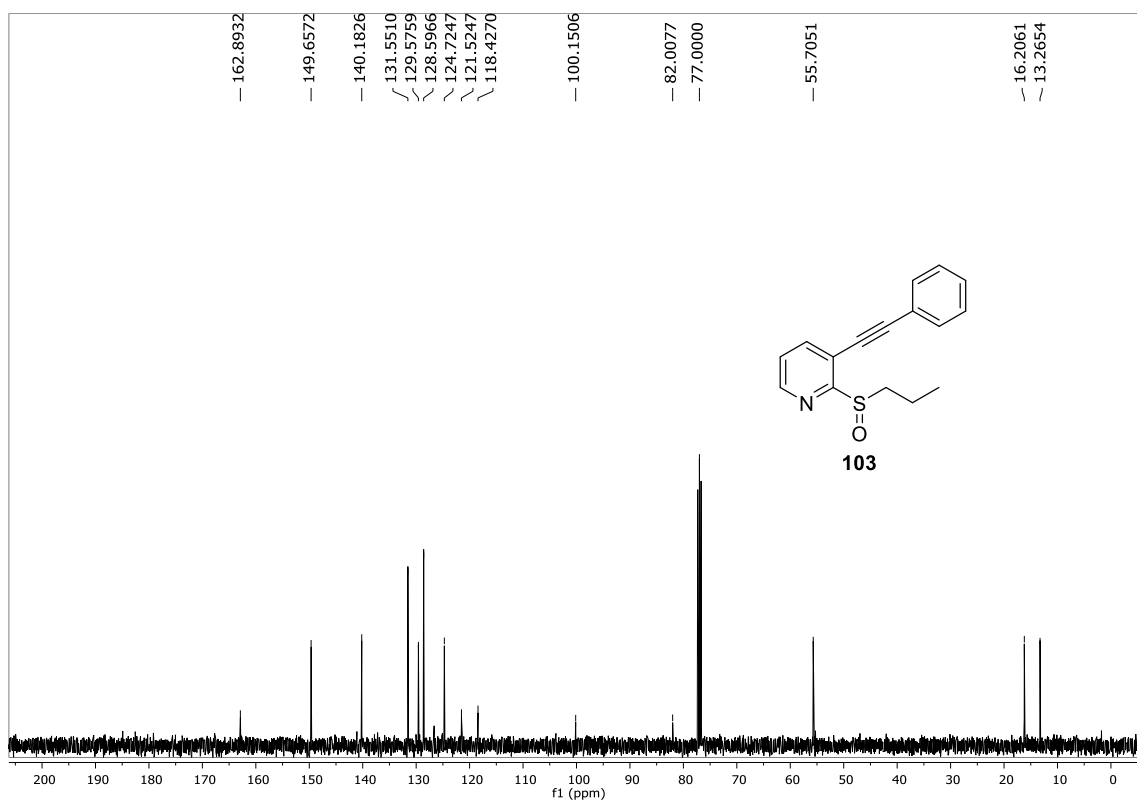


Figura 172. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **103**.

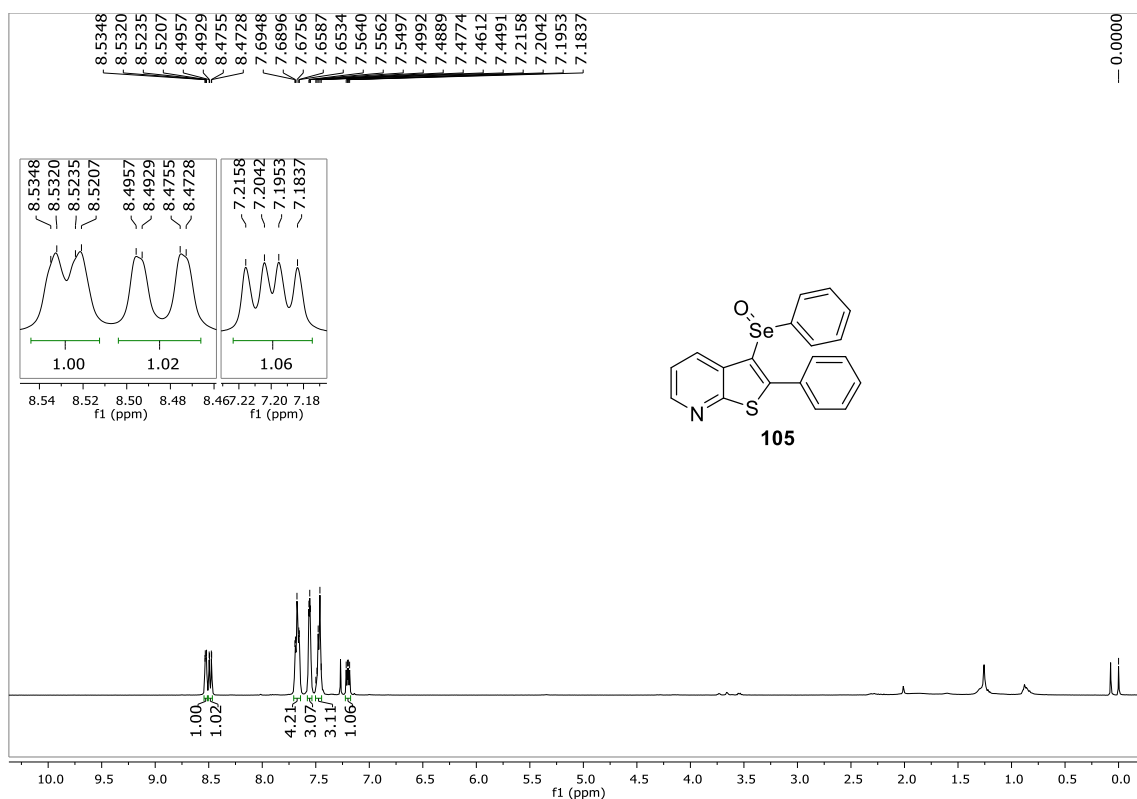


Figura 173. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **105**.

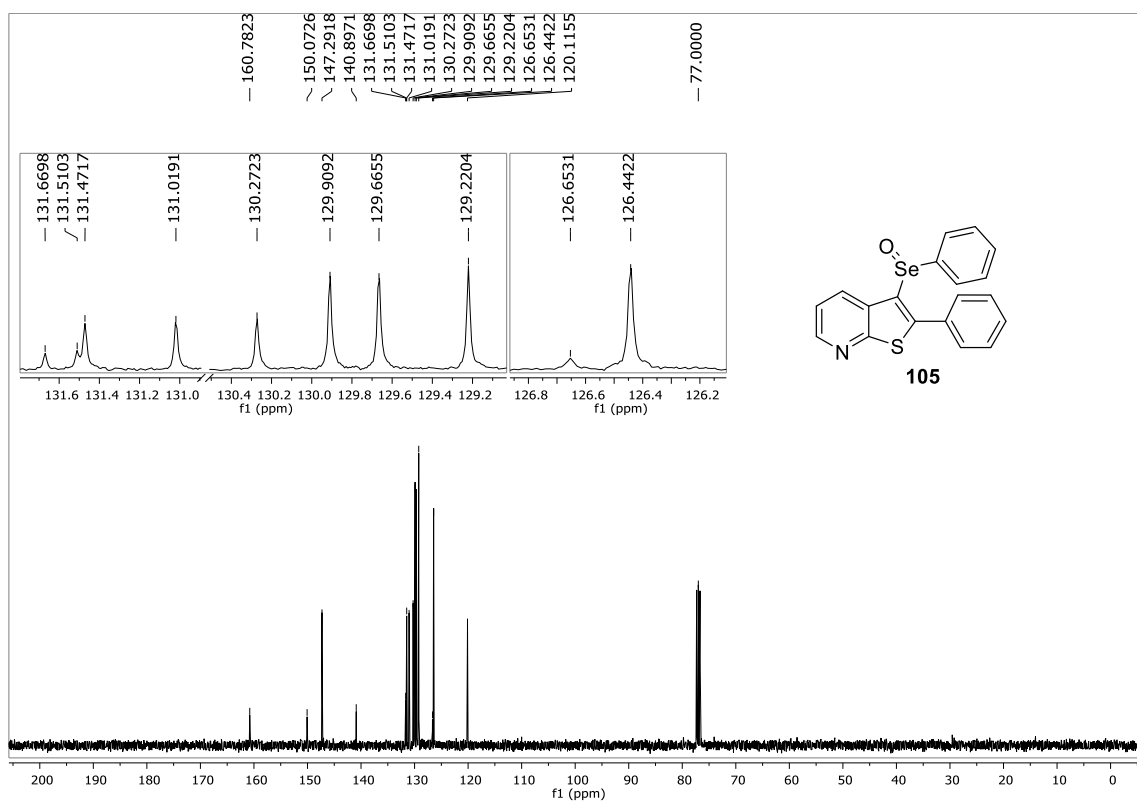


Figura 174. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **105**.

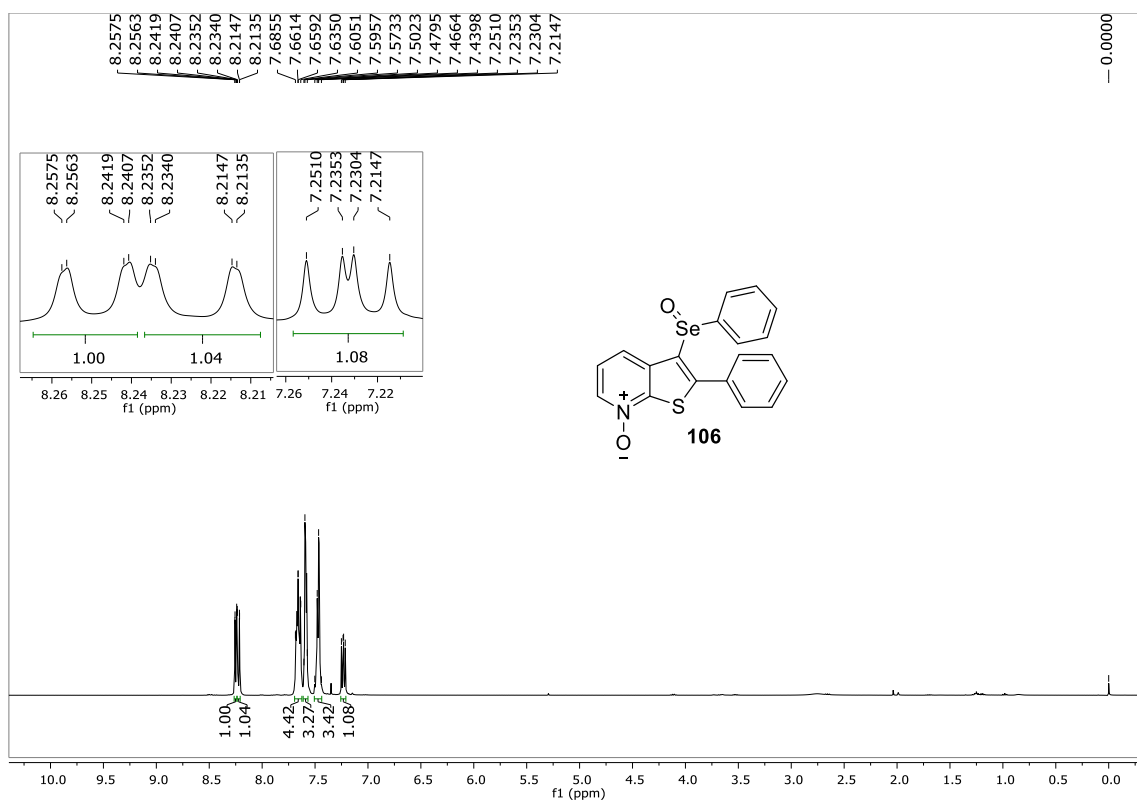


Figura 175. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **106**.

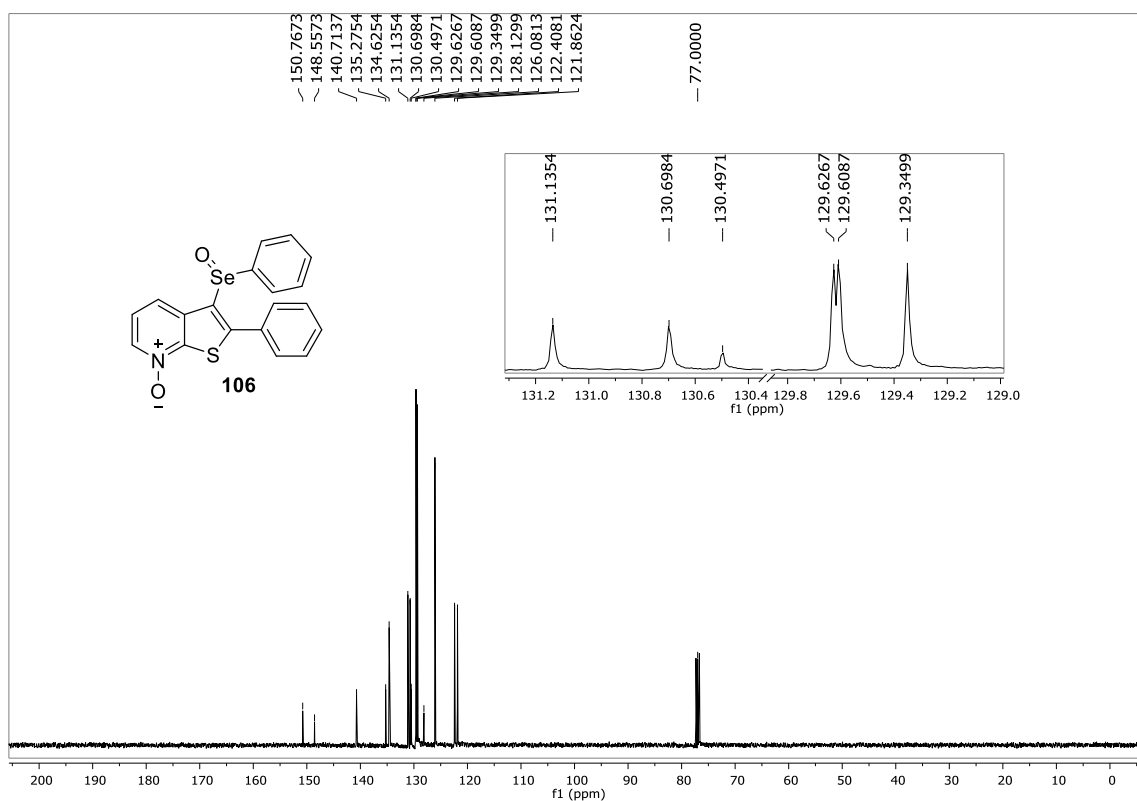


Figura 176. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **106**.

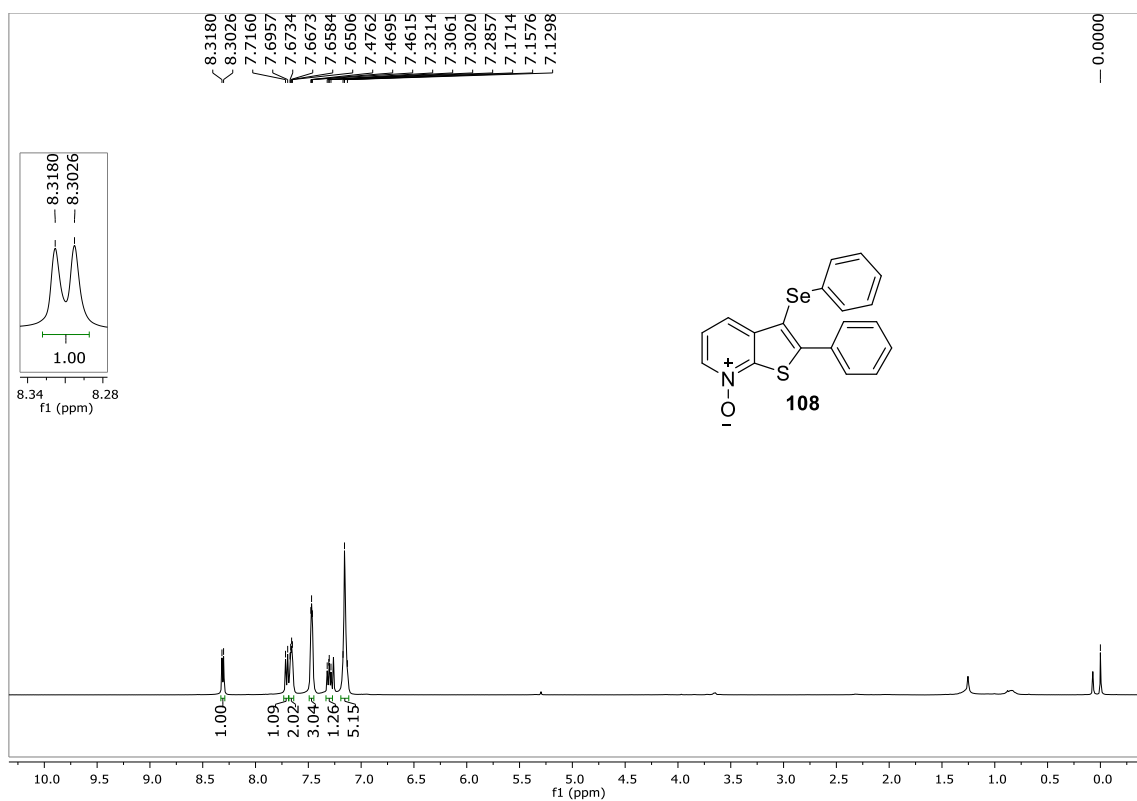


Figura 177. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **108**.

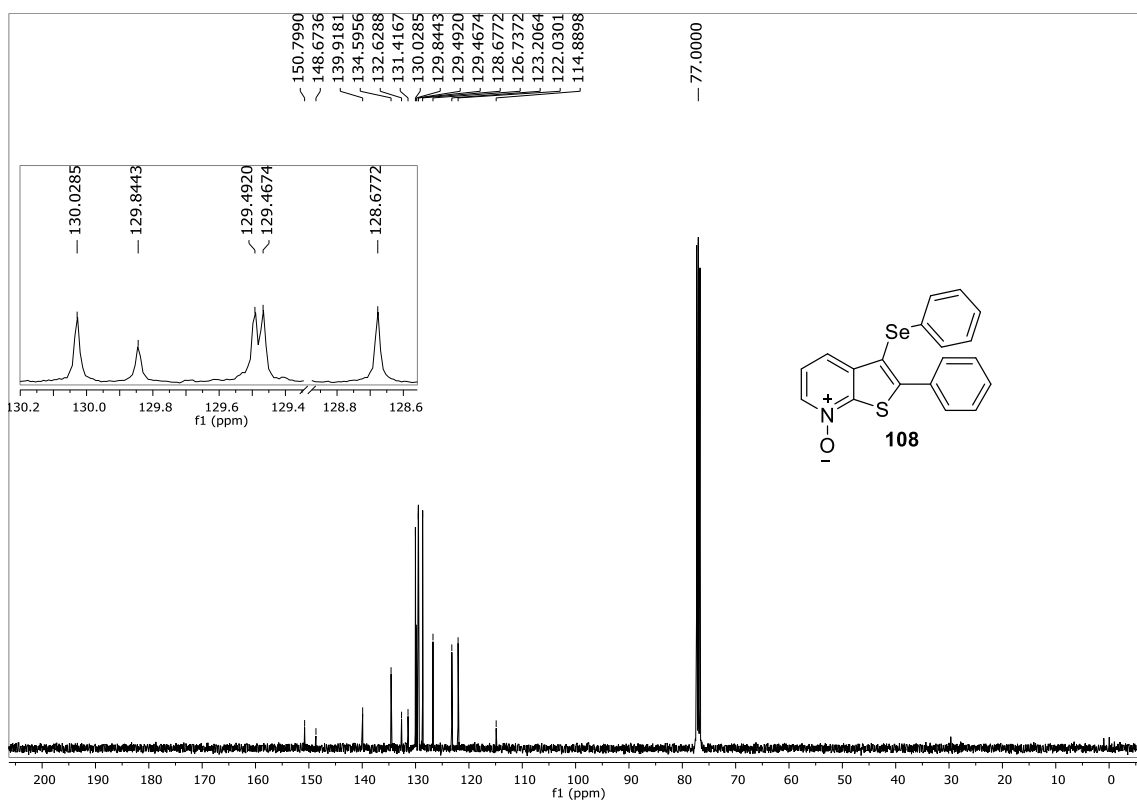


Figura 178. Espectro de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (100 MHz, CDCl_3) do produto **108**.

6. Espectros Seleccionados

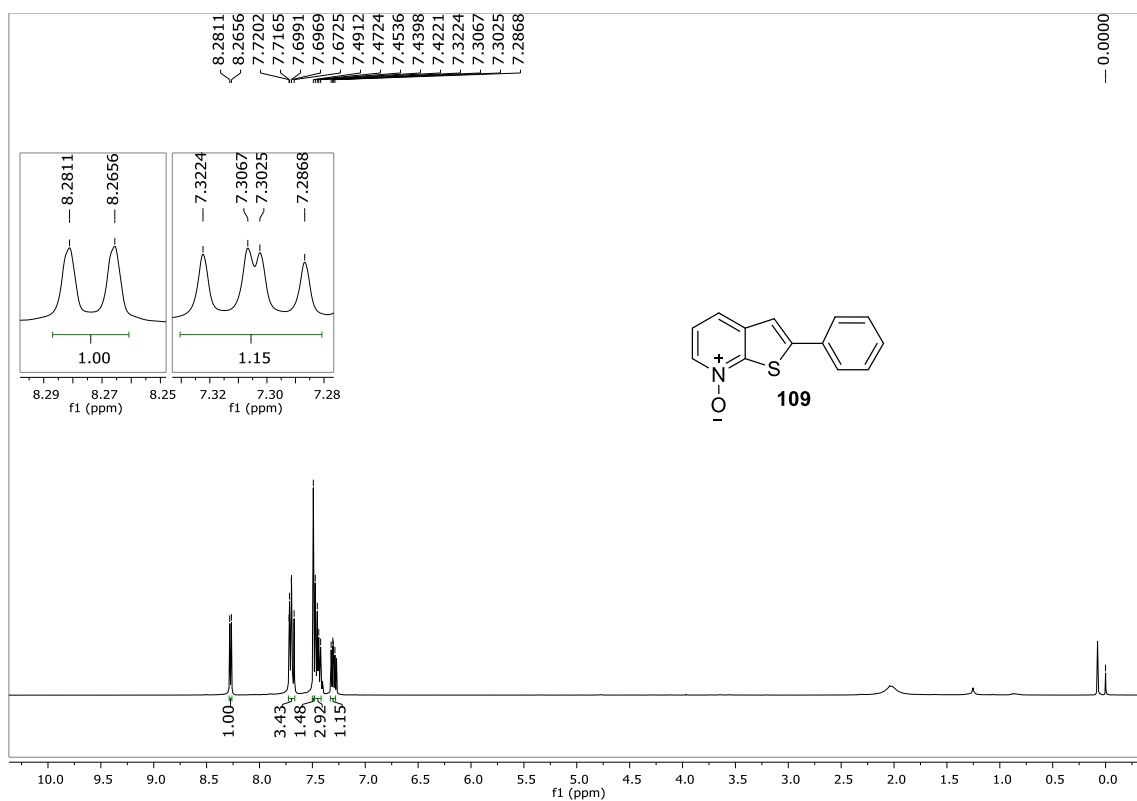


Figura 179. Espectro de RMN ¹H (400 MHz, CDCl₃) do produto **109**.

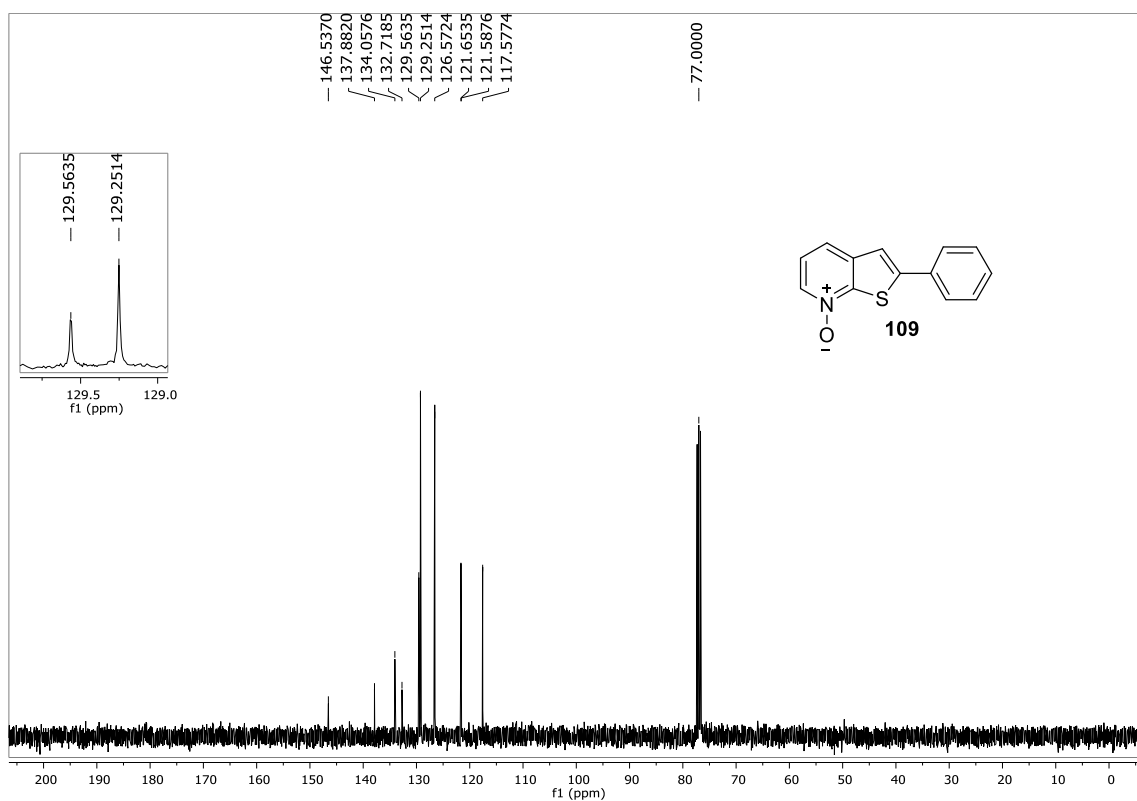


Figura 180. Espectro de RMN ¹³C{¹H} (100 MHz, CDCl₃) do produto **109**.

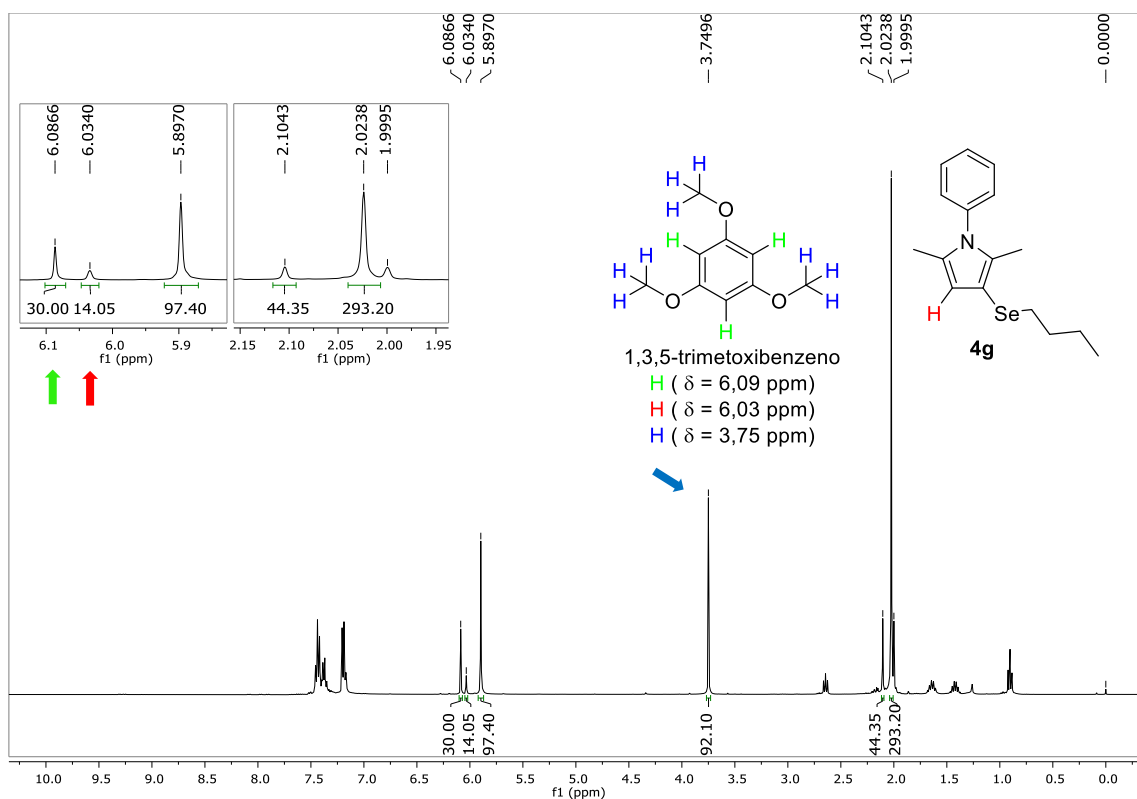


Figura 181. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **4g** com a utilização de 1,3,5-trimetoxibenzeno como padrão interno.

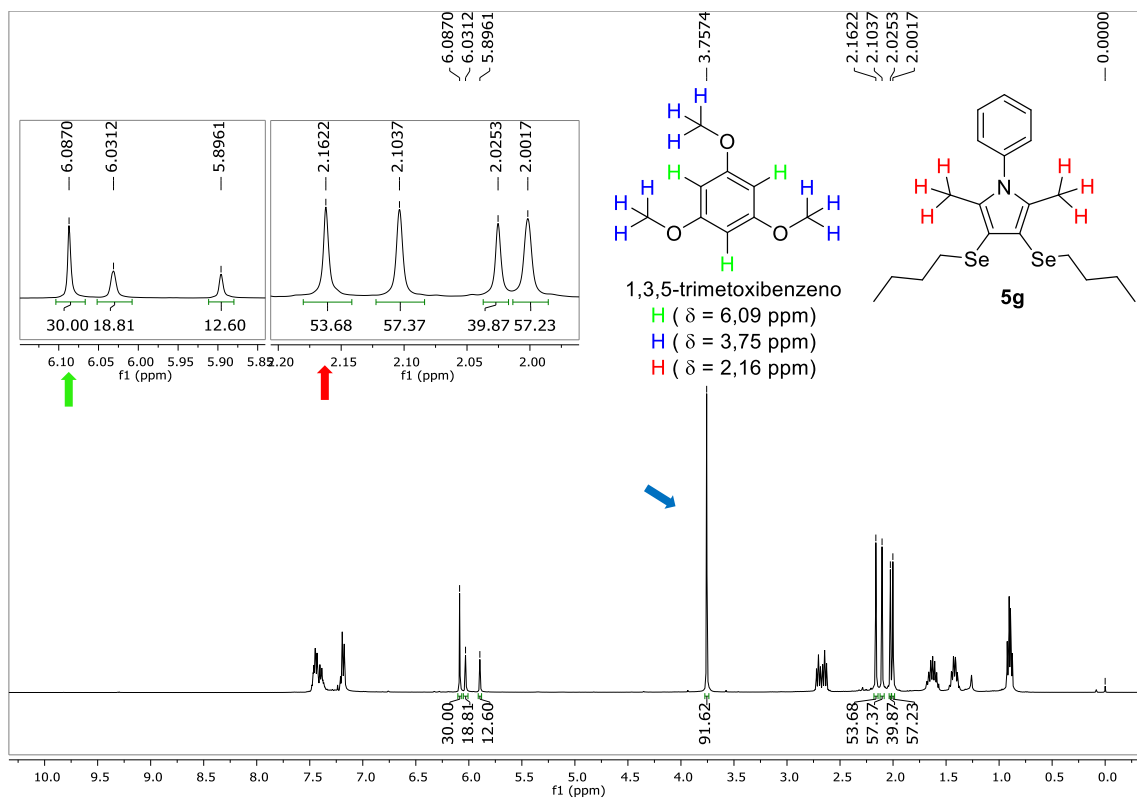


Figura 182. Espectro de RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) do produto **5g** com a utilização de 1,3,5-trimetoxibenzeno como padrão interno.

Tabela 7: Dados da coleta de intensidades de difração e do refinamento da estrutura cristalina calculada para os compostos **7a**, **7j** e **106**.

Dados	7a	7j	106
Fórmula	C ₁₉ H ₁₃ NSSe	C ₂₃ H ₁₅ NSSe	C ₁₉ H ₁₃ NO ₂ SSe
CCDC n°	2054144	2054145	2054146
F.W. (g mol ⁻¹)	366,32	416,38	398,32
T (K)	302(2)	302(2)	301(2)
Sistema cristalino	Ortorrômbico	Triclínico	Triclínico
Grupo espacial	<i>Pca</i> 2 ₁	P-1	P-1
<i>a</i> (Å)	15,684(4)	9,899(3)	8,6265(15)
<i>b</i> (Å)	18,483(7)	10,015(3)	8,9956(18)
<i>c</i> (Å)	11,177(3)	10,199(2)	12,372(3)
α (°)	90	98,730(15)	73,048(8)
β (°)	90	107,885(9)	88,104(13)
γ (°)	90	102,596(12)	67,285(11)
<i>V</i> (Å ³)	3239,8(17)	912,6(4)	843,7(3)
<i>Z</i>	8	2	2
<i>D</i> _{calc} (g cm ⁻³)	1,502	1,515	1,568
Coeficiente de abs. (mm ⁻¹)	2,442	2,177	2,360
λ (Å)	0,71073	0,71073	0,71073
<i>F</i> (000)	1472	420	400
Núm. de refl. coletados	47633	21807	22605
Núm. de refl. Independentes (<i>R</i> _{int})	9723 (0,0544)	5561 (0,0344)	5156 (0,0310)
<i>R</i> ₁ [<i>I</i> > 2 σ (<i>I</i>)]	0,0369	0,0295	0,0342
<i>wR</i> ₂ [<i>I</i> > 2 σ (<i>I</i>)]	0,0648	0,0731	0,0736
<i>R</i> ₁ (todos os dados) ^[a]	0,1056	0,0460	0,0591
<i>wR</i> ₂ (todos os dados) ^[b]	0,0784	0,0801	0,0821
<i>Goodness-of-fit</i> em <i>F</i> ²	0,985	1,025	1,024
Densidade elet. residual (e.Å ⁻³)	0,329 e -0,360	0,534 e -0,716	0,413 e -0,548

^[a] $R_1 = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$; ^[b] $wR_2 = \{ \sum w(F_o^2 - F_c^2)^2 / \sum w(F_o^2)^2 \}^{1/2}$

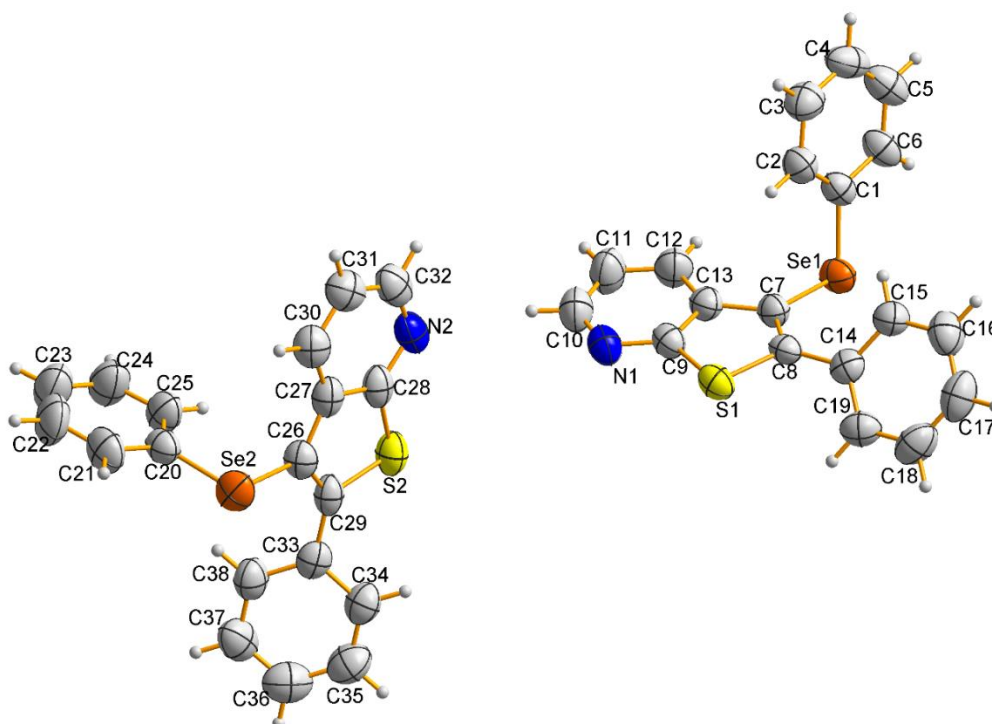


Figura 183. Gráfico de elipsóides térmicos anisotrópicos a 50% de probabilidade do composto **7a**. A estrutura cristalina deste composto contém duas moléculas independentes.

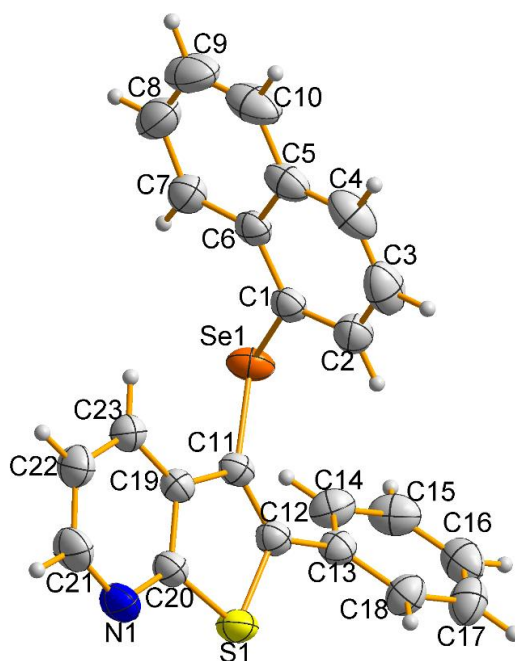


Figura 184. Estrutura molecular de **7j**. Os elipsóides são representados com 50% de probabilidade.

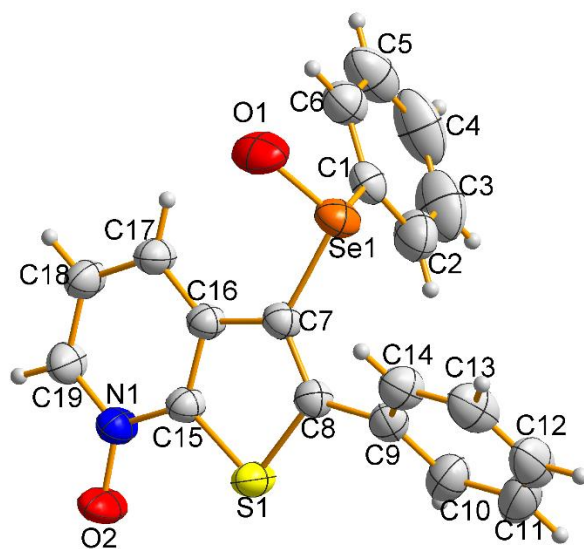


Figura 185. Elipsóides térmicos anisotrópicos plotagens a 50% de probabilidade do composto **106**.