monoamida do ácido oxálico. O amino-hidroximetileno é o aminooxicarbeno mais simples, um isômero da formamida e do ácido formimídico. Os investigadores verificaram que o aminooxicarbeno é estável em condições criogénicas e a sua decomposição em $\text{HNCO} + \text{H}_2 + \text{NH}_3 + \text{CO}$ só ocorre quando o confórmero *trans* é irradiado a 254 nm. Este resultado contrasta com outros hidroxicarbénos e aminometileno, que sofrem migrações [1,2]-H originando os carbonilos ou iminas correspondentes. Devido à estabilização muito significativa do heteroátomo, o efeito de túnel mecânico quântico (QMT, do inglês *quantum mechanical tunneling*) do confórmero *trans* para formamida ou ácido formimídico não ocorre em escala de tempo de laboratório, mas pode ser relevante

em processos astroquímicos, de acordo com os investigadores. Os dados experimentais são bem suportados pelos resultados dos cálculos CCSD(T)/cc-pVTZ e B3LYP/6-311++G(3df, 3pd).

>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

Fontes

Aminohydroxymethylene, chemistryviews.org/details/news/11313638/Aminohydroxymethylene.html (acedido em 04/09/2021).

B. Bernhardt, M. Ruth, H. P. Reisenauer, P. R. Schreiner, *J. Phys. Chem. A* **2021**, 125, 7023–7028. DOI: 10.1021/acs.jpca.1c06151.

Fluoração de 2H-Indazoles

A prevalência de compostos organofluorados em quase todas as áreas da química, em particular em química medicinal, em química de materiais e na agricultura, inspirou os químicos orgânicos a desenvolver vários métodos para a formação da ligação C–F como resposta às necessidades dos setores agroquímico e farmacêutico. O flúor ocupa uma posição de destaque, em especial na conceção de fármacos. A introdução de flúor em moléculas orgânicas cria a possibilidade de melhorar a estabilidade metabólica e a capacidade de modulação da lipofilia. Os átomos de flúor podem ser introduzidos usando reagentes como fluoreto de tetrabutilamónio (TBAF, do inglês *tetrabutylammonium fluoride*), Selectfluor® ou *N*-fluorobenzenossulfonimida (NFSI, do inglês *N-fluorobenzenesulfonimide*). Este último composto é particularmente útil por ser um sólido estável, não higroscópico e de fácil manuseamento.

Payel Ghosh e Alakananda Hajra (Universidade Visva-Bharati, Santiniketan, Índia) desenvolveram um método de fluoração simples, e sem utilização de metais, de 2H-indazoles, em água, usando NFSI como fonte de flúor. As reações foram realizadas em água, a 80 °C, com tempos de reação que variaram de 15 min a 8 h, dependendo do substrato. Vários derivados de 2-fenil-2H-indazole, de 2-benzil-2H-indazole e um 2H-indazole com um grupo *terc*-butilo na posição *N*-2 foram convertidos, com sucesso, aos respetivos compostos fluorados. Estes derivados foram obtidos,

Crédito: ChemistryViews

geralmente, com rendimentos moderados a bons e com boa regiosseletividade para a posição C-3. O protocolo experimental usa água como solvente e pode ser realizado numa escala de grama.

>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

Fontes

Fluorination of 2H-Indazoles, chemistryviews.org/details/news/11311345/Fluorination_of_2H-Indazoles.html (acedido em 28/07/2021).

P. Ghosh, A. Hajra, *J. Org. Chem.* **2021**, 86, 10883–10888. DOI: 10.1021/acs.joc.1c01253.