

Síntese e caracterização de novos híbridos 1,2,3-triazólicos derivados do paeonol com potencial bioativo

William dos S. Belarmino¹ (PG)*, Gisely F. Moura¹ (PG), Aidene de F. C. Faria¹ (PG), Mariana B. de Oliveira² (PG), Quésia H. C. Serpa¹ (IC), Poliana A. R. Gazolla¹ (PG), Róbson R. Teixeira³ (PQ), Vagner T. de Queiroz¹ (PQ), Adilson V. Costa¹ (PQ).

william.belarmino@edu.ufes.br

¹Departamento de Química e Física, UFES, Alegre, ES, Brasil; ²Departamento de Química, UFES, Vitória, ES, Brasil;

³Departamento de Química, UFV, Viçosa, MG, Brasil.

Palavras Chave: 1,2,3-triazol, Reação “Click”, Semissíntese, Fenol natural.

Introdução

O desenvolvimento de compostos híbridos a partir de estruturas heterocíclicas destaca-se como uma estratégia promissora na busca por novos agroquímicos. Os 1,2,3-triazóis são heterociclos nitrogenados amplamente reconhecidos por suas propriedades bioativas e biodisponibilidade, sendo considerados potenciais agentes antifúngicos na agricultura^{1,2}. Estes compostos podem ser obtidos a partir de diferentes substratos. O paeonol, um fenol natural com ampla bioatividade, torna-se um excelente núcleo de partida para modificações estruturais e obtenção de novos híbridos³. Diante disso, objetivou-se a síntese de treze novos híbridos 1,2,3-triazólicos derivados do paeonol, utilizando-se a reação de cicloadição azida-alcino catalisada por cobre (I) (*click chemistry*) como etapa-chave para construção das moléculas-alvo.

Resultados e Discussão

A rota sintética adotada para obtenção dos triazóis do paeonol foi simples e eficiente, realizada em duas etapas (Figura 1). Inicialmente, o paeonol reagiu com brometo de propargila via S_N2, formando um intermediário alquinil (1). Em seguida, esse intermediário foi submetido à reação de cicloadição 1,3-dipolar com azidas comerciais, catalisada por Cu(I), gerando seletivamente os derivados 1,2,3-triazólicos (2a–2m) com rendimentos entre 52% e 89%. A metodologia baseada na reação do tipo “*click chemistry*” apresentou bons rendimentos e alta eficiência na formação dos compostos alvo, sendo especialmente relevante por viabilizar, de forma rápida e seletiva, a síntese de moléculas bioativas sob condições brandas, com potencial farmacológico ou pesticida. Além disso, todos os derivados triazólicos tiveram suas estruturas elucidadas por IV, RMN de ¹H e ¹³C, e espectrometria de massas. No espectro de RMN de ¹H (Figura 2) foi possível identificar o simplesito mais desblindado em 8,12 ppm, atribuído ao H-10 presente no anel triazólico.

Figura 1. Rota sintética dos 1,2,3-triazóis do paeonol.

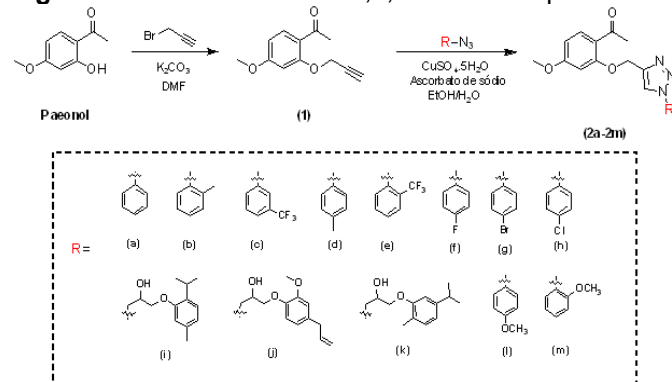
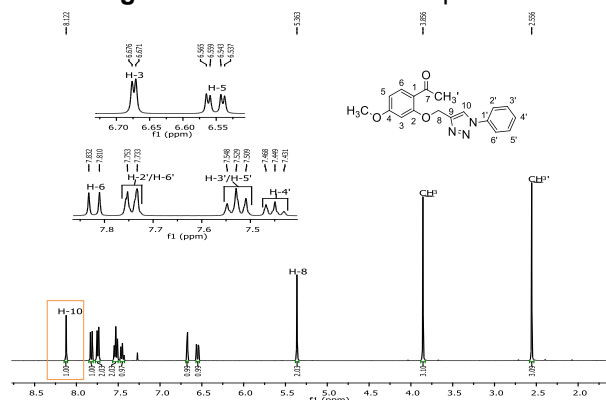


Figura 2. RMN de ¹H do composto 2a.



Conclusões

A reação *click* mostrou-se uma estratégia eficiente e seletiva na síntese de híbridos moleculares com rendimentos satisfatórios, utilizando o paeonol como material de partida. Dessa forma, os resultados evidenciam o potencial desta metodologia no desenvolvimento de moléculas derivadas de produtos naturais com potencial bioativo.

Agradecimentos

UFES, FAPES, CNPq, CAPES, GEAPS e PPGAQ.

¹Addo, J. K. *et al. Heliyon*. 10, 10836, 2022. ²Costa, A. V. *et al. J. B. C. Soc.* 31, 832, 2020. ³Figuerola, L. P. R. *et al. J. B. C. Soc.* 34, 35, 2023.