

# Síntese de 1,2,3- triazóis inéditos derivados do paeonol via “Click Chemistry”

Gisely F. Moura (PG)<sup>1\*</sup>, Aidene de F. C. Faria (PG)<sup>1</sup>, William dos S. Belarmino (PG)<sup>1</sup>, Mariana B. de Oliveira (PG)<sup>2</sup>, Quésia H. C. Serpa (PG)<sup>1</sup>, Poliana A. R. Gazolla (PG)<sup>1</sup>, Róbson R. Teixeira (PQ)<sup>3</sup>, Vagner T. de Queiroz (PQ)<sup>1</sup>, Adilson V. Costa (PG)<sup>1</sup>

*g.m.ferreira@gmail.com*

<sup>1</sup>Departamento de Química e Física, UFES, Alegre, ES, Brasil; <sup>2</sup>Departamento de Química, UFES, Vitória, ES, Brasil;

<sup>3</sup>Departamento de Química, UFV, Viçosa, MG, Brasil.

Palavras Chave: Cicloadição 1,3-dipolar, Fenol natural, Heterociclos, Síntese orgânica.

## Introdução

A modificação estrutural de moléculas com potencial bioativo é uma alternativa importante na síntese de compostos funcionais inéditos. Esses compostos podem ser obtidos por meio da reação de cicloadição 1,3-dipolar entre alcino-azida catalisada por cobre (I), também conhecida como reação “click”<sup>1</sup>. O desenvolvimento de novas alternativas sintéticas eficazes para minimizar os danos de doenças fúngicas na agricultura torna-se cada vez essencial<sup>2</sup>. Nesse sentido, objetivou-se a síntese e caracterização de derivados do paeonol contendo fragmentos 1,2,3-triazólicos, que apresentem propriedades equivalentes aos defensivos agrícolas comerciais.

## Resultados e Discussão

Os 1,2,3-triazóis (**3a-3r**) foram sintetizados a partir do paeonol via reação “click”, na presença de íons cobre (I), como catalisadores (Figura 1). A proposta mecanística consistiu em três etapas: (i) abertura do anel epóxido (**1**), obtido a partir da reação de substituição nucleofílica biomolecular entre o paeonol e a epícloridrina; (ii) formação da azida orgânica (**2**) através da reação de azidólise entre (**1**) e azida de sódio; e (iii) reação “click” entre (**2**) e diferentes alcinos terminais para obtenção de triazóis inéditos (**3a-3r**). Em geral, os compostos apresentaram excelentes rendimentos, variando entre 46% e 94%. O composto **3g** destacou-se com 94% de rendimento, evidenciando a eficiência da reação “click” para a formação de triazóis derivados do paeonol. Todos os compostos foram elucidados por espectroscopia no Infravermelho, Ressonância Magnética Nuclear de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C e espectrometria de massas. No espectro de RMN de <sup>1</sup>H do composto **3g** (Figura 2), o sinal mais desblindado, observado como um simpleto em 7,87 ppm, foi atribuído ao próton H-11, localizado no anel triazólico. Essa atribuição confirma de forma inequívoca a formação do núcleo 1,2,3-triazólico.

Figura 1. Rota de síntese dos 1,2,3-triazóis (**3a-3r**).

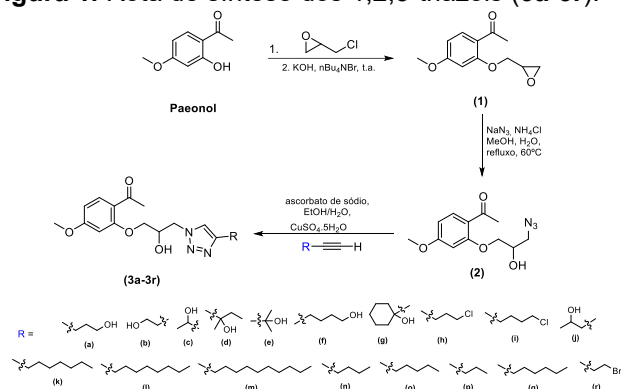
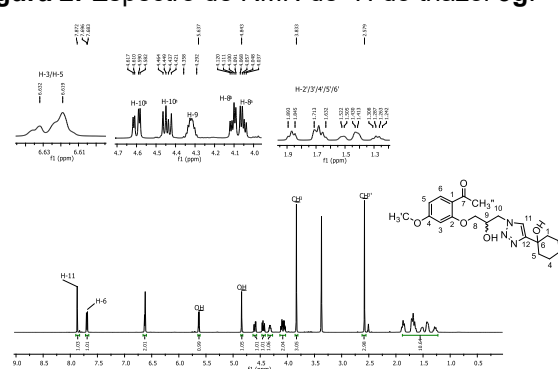


Figura 2: Espectro de RMN de <sup>1</sup>H do triazol **3g**.



## Conclusões

Os derivados triazólicos do paeonol foram obtidos com sucesso, através da reação click, com destaque para o triazol **3g** obtido com 94% de rendimento. Assim, a metodologia demonstra-se eficaz para o desenvolvimento de novos compostos bioativos com potencial aplicação na agroquímica. Contudo, estudos adicionais são essenciais para elucidar os mecanismos e o escopo de aplicações desta reação.

## Agradecimentos

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

<sup>1</sup>Figuerola, L. P. R. *et al. J. Braz. Chem. Soc.*, 34(1), 25-35, 2023. <sup>2</sup>Costa, A. V. *et al. Quimi. Nova.*, 44, (1), 1-14, 2021.