

Síntese de derivados 1,2,3-triazólicos a partir do glicerol via “click chemistry”

Adilson Vidal Costa* (PQ), Marcos Vinicius Lacerda de Oliveira (IC), Patrícia Fontes Pinheiro (PQ), Vagner Tebaldi de Queiroz (PQ) *avcosta@hotmail.com

Universidade Federal do Espírito Santo-CCA/UFES, Departamento de Química e Física, 29500-000, Alegre, ES.

Palavras Chave: triazol, glicerol, click chemistry.

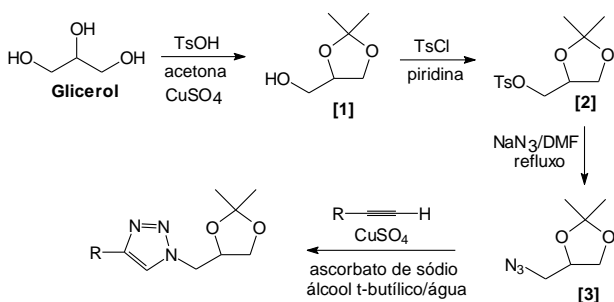
Introdução

Os triazóis são compostos heterocíclicos aromáticos nitrogenados de cinco membros, notavelmente estáveis de transformações metabólicas, eficientes em baixas dosagens e vasta aplicação biológica^{1,2}. Buscando desenvolver novos triazóis com potencial atividade fungicida, no presente trabalho foi explorada a síntese de 1,2,3-triazóis empregando o uso de reações do tipo “click chemistry”, que é uma abordagem para a síntese estereoespecífica de novas moléculas contendo heteroátomos, altamente eficiente e geralmente com bons rendimentos³. Para obtenção dos 1,2,3-triazóis inéditos foi utilizado o glicerol como material de partida. O glicerol é subproduto na síntese do biodiesel considerado um sério problema quando produzido em grande escala, com isso é fundamental buscar alternativas para o consumo desse volume extra de glicerol, assim espera-se obter compostos de aplicação em grande escala, agregando valor a esse subproduto.

Por meio de reação do glicerol com acetona catalisada por ácido p-toluenossulfônico, foi realizada a proteção do diol levando a obtenção do acetal (**1**), com 63% de rendimento. O acetal obtido foi transformado no intermediário (**2**), no qual a hidroxila foi derivatizada para a função tosilsulfonato com 75% de rendimento, na presença de cloreto de p-toluenossulfonila. A obtenção da azida orgânica (**3**) foi realizada a partir da substituição nucleofílica do grupo tosila pelo grupamento azida, através da reação de (**2**) com azida de sódio em DMF e refluxo. A obtenção dos derivados triazólicos foi realizada usando a “reação Click” entre a azida (**3**) e os alcinos terminais, usando uma quantidade catalítica de sulfato de cobre, ascorbato de sódio e álcool t-butílico e água como solventes, obtendo-se os compostos (**4**) a (**11**) com rendimentos entre 65% e 84%. A caracterização das estruturas dos compostos sintetizados foi obtida pela análise dos espectros no IV, massas e RMN de ¹H e de ¹³C.

Resultados e Discussão

Através de transformações de grupos funcionais do material de partida foram obtidos oito triazóis inéditos, conforme apresentado na Figura 1.



Alcinos Terminais	Rendimento (%)
(4) álcool propargílico	76
(5) but-3-in-1-ol	82
(6) pent-4-in-1-ol	68
(7) but-3-in-2-ol	75
(8) pent-4-in-2-ol	70
(9) 3-metil-pent-1-in-3-ol	84
(10) 1-etinil-ciclohexan-1-ol	65
(11) 2-metil-but-3-in-2-ol	73

Conclusões

As transformações químicas efetuadas a partir do glicerol mostraram-se eficientes para obtenção dos novos triazóis, tendo em vista os bons rendimentos obtidos e a facilidade de separação dos produtos. Esses fatos mostram a alta seletividade dos reagentes utilizados na síntese dos referidos compostos. Os oito triazóis inéditos preparados a partir do glicerol serão submetidos a testes de atividade fungicida.

Agradecimentos

FAPES, CNPq, CCA/UFES

¹Prasanna, R.; Purushothaman, S.; Raghunathan, R. *Tetrahedron Lett.* **2010**, 34, 4538

²Melo, J. O. F.; Donnici, C. L.; Augusti, R.; Ferreira, V. F.; de Souza, M. C. B. V.; Ferreira, M. L. G.; Cunha, A. C. *Quim. Nova* **2006**, 29, 569.

³Kolb, H. C.; Fin, M. G.; Sharpless, K. B. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2001**, 40, 2004.

Figura 1. Rota sintética para preparo dos triazóis.