

## Síntese de ligantes flexíveis simétricos derivados de tetrazol e ácido carboxílico.

Fernando Molin\* (PQ)<sup>1</sup>, Morgana C. Vicente (IC)<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Departamento Acadêmico de Química e Biologia, Campus Curitiba, sede Ecoville, Curitiba, PR.

Palavras Chave: tetrazol; mimético ácido; ligantes simétricos

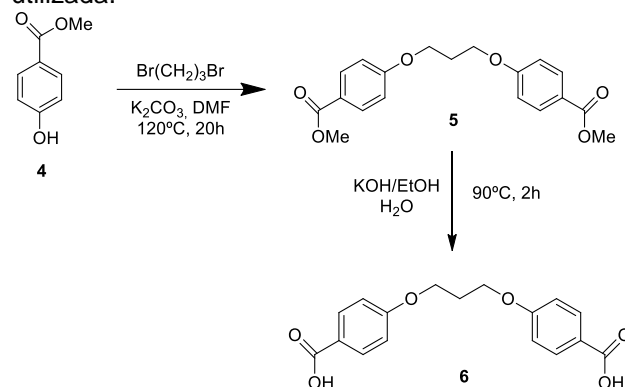
### Introdução

A dinâmica desenvolvida pela química do tetrazol durante os últimos 20 anos pode ser atribuída à sua aplicação na medicina, bioquímica, agricultura, fotografia, explosivos, entre outros.<sup>1</sup> Uma das razões é a acidez dos tetrazóis ser muito semelhante à dos ácidos carboxílicos<sup>2</sup>, agindo como miméticos ácidos.

Além de ser um excelente nucleófilo, os tetrazóis agem como importantes ligantes na obtenção de complexos<sup>3,4</sup>, sendo que os conceitos e estratégias desenvolvidas nessa área podem ser aplicados no design e geração de redes de coordenação<sup>5</sup>, poliméricas e supramoleculares.

Desta forma, foi proposta a síntese de diferentes ligantes flexíveis simétricos variando o grupo ácido carboxílico pelo tetrazol, os quais serão usados em metodologias sintéticas com diferentes metais.

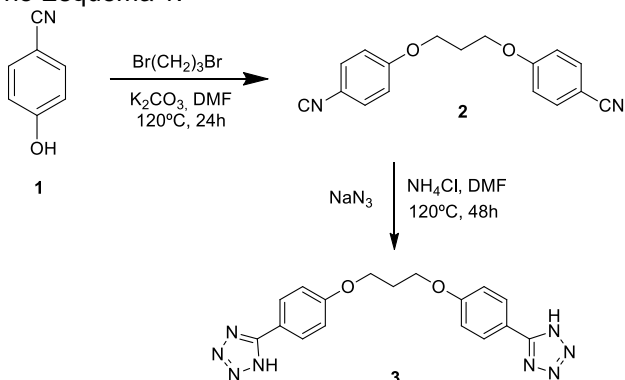
excesso para haver a formação do diéster 5. A partir do diéster 5 fez-se a hidrólise para a formação do composto final.<sup>7</sup> O esquema 2 mostra a rota sintética utilizada.



Esquema 2. Rota sintética do ácido 6.

### Resultados e Discussão

Primeiramente realizou-se a síntese da dinitrila 2 a partir da alquilação do 4-cianofenol com 1,3-dibromopropano. Para a alquilação ocorrer formando uma dinitrila fez-se necessário um excesso do 4-cianofenol. Partindo da dinitrila 2 foi realizada uma adição 1,3-dipolar para a formação do anel tetrazol, com azida de sódio e cloreto de amônio, formando o bistetrazol 3<sup>6</sup>. A rota sintética é mostrada no Esquema 1.



Esquema 1. Rota sintética do bistetrazol 3.

Para sintetizar o ácido 6, em princípio realizou-se a alquilação do 4-hidroxibenzoato de metila com 1,3-dibromopropano, sendo o primeiro em

### Conclusões

Dois novos ligantes foram sintetizados com bons rendimentos, sendo que o bistetrazol 3 é inédito. Todos os intermediários e compostos finais foram caracterizados através de espectroscopia de infravermelho e RMN-<sup>1</sup>H. Como continuação do trabalho, os ligantes serão utilizados em colaboração para a síntese de complexos.

### Agradecimentos

A Universidade Tecnológica Federal do Paraná e ao CNPq.

<sup>1</sup> Sadlej-Sosnowska, N.; *J. Org. Chem.* **2001**, v. 66, p. 8737 – 8743.

<sup>2</sup> Benson, F. R.; *Chem. Rev.*, **1947**, 41 (1), pp 1–61.

<sup>3</sup> Gallardo, H.; Meyer, E.; Bortoluzzi, A. J.; Molin, F.; Mangrich, A. S.; *Inorg. Chim. Acta* **2004**, 357, 505-512

<sup>4</sup> Gallardo, H.; Molin, F.; Bortoluzzi, A. J.; Neves, A.; *Acta Cryst.* **2008**, E64, m541-m542.

<sup>5</sup> Bourlier, J.; et al; *New J. Chem.*, **2007**, 31, 25-32.

<sup>6</sup> Meyer, E.; et al;; *J. Mater. Chem.* **1998**, 8(6), 1351-1354

<sup>7</sup> Kesava Reddy, M.; et al; *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **2013**, vol 582, pp. 1-14.