

IX ENEPEX/ XIII EPEX-UEMS E XVII ENEPE-UFMG

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE (2-(PIRAZOIL)FENIL)-CHALCONAS

Brenda Lima Lopes (brendalimalopesbts@gmail.com)

Cristiane Storck Schwalm (cristianeschwalm@ufgd.edu.br)

Chalconas e derivados pirazólicos são duas classes de compostos que despertam bastante interesse da comunidade científica, seja por suas possíveis aplicações em química medicinal quanto àquelas relacionadas as interessantes propriedades fotofísicas dos dois núcleos. Neste contexto, a síntese e caracterização de novos compostos híbridos chalcona-pirazol apresenta-se como um objetivo atraente. Neste trabalho, tivemos como objetivo a síntese e caracterização da 3-(1H-pirazol-4-il)chalcona, através da reação de Heck entre 4-iodopirazol e chalcona. Inicialmente, preparamos os dois substratos necessários para conduzir a reação de acoplamento desejado: o 4-iodopirazol foi obtido a partir do pirazol, em uma reação de iodação utilizando iodeto de potássio e iodo molecular, enquanto a chalcona foi obtida pela condensação de Claisen-Schmidt entre benzaldeído e acetofenona em meio básico. Antes de realizar a tentativa de acoplamento entre estes dois, realizamos algumas reações modelo, envolvendo iodobenzeno e chalcona, bem como acrilato de n-butila, para verificar se nosso aparato experimental permitia reproduzir os resultados descritos para transformações semelhantes na literatura. Com a resposta positiva, passamos a de fato investigar a transformação de interesse, realizando tentativas de acoplamento entre iodopirazol e chalcona sob catálise de acetato de paládio, trifenilfosfina ou tri-*o*-toluillfosfina como ligante e carbonato de potássio como base, em dimetilformamida como solvente, sob aquecimento. No entanto, sob as condições testadas, não foi possível obter o produto desejado, sendo observados apenas subprodutos oriundos da adição de Michael de 4-iodopirazol e pirazol – este último formado no meio reacional - à chalcona. A fim de verificar a viabilidade do 4-iodopirazol como eletrófilo na reação de Heck, tentamos realizar uma reação com acrilato de n-butila; no entanto, novamente foi observada apenas a adição de Michael deste reagente. Por fim, para excluir esta possibilidade, procedemos à proteção de um dos átomos de nitrogênio do pirazol por uma reação de acetilação, o qual estamos testando como uma nova

IX ENEPEX/ XIII EPEX-UEMS E XVII ENEPE-UFGD

possibilidade de eletrófilo. Embora os produtos desejados ainda não tenham sido obtidos, foi possível sintetizar com sucesso os materiais de partida, bem como aumentar a compreensão sobre a transformação estudada através do isolamento de subprodutos, os quais foram caracterizados pelas técnicas de ressonância magnética nuclear de hidrogênio e carbono.