

## SÍNTESE DE BODIPY VIA ADUTO DE VILSMEIER-HAACK E AVALIAÇÃO DA FLUORESCÊNCIA. <sup>1</sup>

Pedro Henrique Muer<sup>2</sup>, Rogério Aparecido Gariani<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Vinculado ao projeto “Preparo e aplicação de seleno- e teluro-derivados de aza-BODIPY: quimiossensores fluorescentes na região do infravermelho próximo.”

<sup>2</sup> Acadêmico do Curso de Licenciatura em Química – CCT – Bolsista PIBIC/UDESC

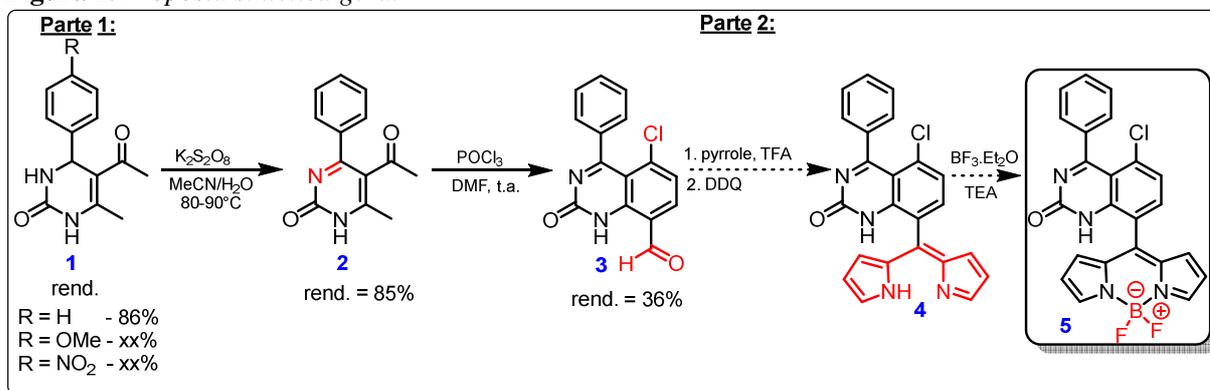
<sup>3</sup> Orientador, Departamento de Química – CCT – rogerio.gariani@udesc.br.

BODIPY, ou difluoroboreto de difenilpirileno, é uma classe de corantes fluorescentes altamente versáteis e amplamente utilizados em diversas aplicações científicas e tecnológicas. Sua notável popularidade deve-se às suas propriedades fotofísicas excepcionais, incluindo alta absorção e emissão de luz em uma ampla gama de comprimentos de onda, bem como excelente estabilidade química e fotoquímica [1].

A fluorescência do BODIPY é altamente eficiente, tornando-o uma escolha ideal para estudos de marcação em biologia celular, rastreamento de moléculas em sistemas vivos e investigação de processos fotofísicos e fotoquímicos. Além disso, sua estrutura química permite modificações precisas, tornando possível projetar sondas fluorescentes específicas para várias aplicações [2].

Neste contexto, exploraremos a síntese do BODIPY partindo de um aduto de Vilsmeier-Haack (VH) oriundo de uma dihidropirimidinona (DHPM), conforme síntese proposta na figura 1.

**Figura 1.** Proposta sintética geral



A estratégia sintética para a obtenção do núcleo BODIPY foi dividida em duas partes, a **parte 1** iniciou-se com o preparo da DHPM **1** em um rendimento químico de 86%, a qual é o composto modelo para a otimização da rota sintética. Outras DHPM com diferentes substituintes (R = OMe e NO<sub>2</sub>) foram sintetizadas e devidamente caracterizadas por RMN de <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, DEPT135, IV, e CG/EM. A obtenção do composto **2**, foi alcançada depois de inúmeras tentativas de oxidação com persulfato de potássio (K<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>8</sub>), o rendimento foi otimizado após ajustes da extração do meio reacional, fornecendo a DHPM **2** em 85% de rendimento e a caracterização foi realizada conforme as técnicas de RMN de <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, DEPT135, IV e EMAR. No momento, o estudo está centrado na otimização das condições reacionais para obtenção do composto **3**, o qual será utilizado na produção do BODIPY **5** na parte 2 da proposta sintética geral (Fig. 1). O produto **3**

até o momento foi obtido em 36% de rendimento e caracterizado por RMN de  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , DEPT135 e IV. No entanto, a otimização desta etapa esta em andamento, e o foco principal é abandonar o sistema tradicional ( $\text{POCl}_3/\text{DMF}$ ) por um método alternativo encontrado na literatura [3], o qual utiliza o ácido triclorocianúrico em DMF para gerar o intermediário de Vilsmeier-Haack.

Em suma, a utilização de dihidropirimidionas como material de partida para obtenção do BODIPY **5** (inédito) está em fase final, as etapas até o momento executadas apresentaram rendimentos satisfatórios, as medidas fotofísicas do produto final serão realizadas na Universidade de São Paulo.

**Palavras-chave:** Síntese. Bodipy. Quimiossensores fluorescentes.

### Referências

1. PODDAR, M. et al. *Coordination Chemistry Reviews*, v. 421, p. 213462, 2020.
2. MAO, Z. et al. *Coordination Chemistry Reviews*, v. 476, p. 214908, 2023.
3. MUDDAM, B. et al. *Synlett*, v. 29, p. 85, 2018.