

Síntese de materiais híbridos cinamatos-isoxazol líquido-cristalinos.

Rafaela R. da Rosa¹ (PG), Irwing S. Brose¹ (IC), Aloir A. Merlo^{1*} (PQ)

¹Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Química, Av. Bento Gonçalves 9500, Porto Alegre, RS, Brasil.
*aloir.merlo@ufrgs.br

Palavras Chave: Moléculas híbridas, isoxazol, éster cinâmico, cicloadição [3+2] 1,3-dipolar, cristal líquido.

Introdução

Materiais híbridos funcionais orgânicos são importantes do ponto de vista acadêmico e tecnológico em virtude da incorporação de diferentes propriedades em uma única arquitetura molecular.

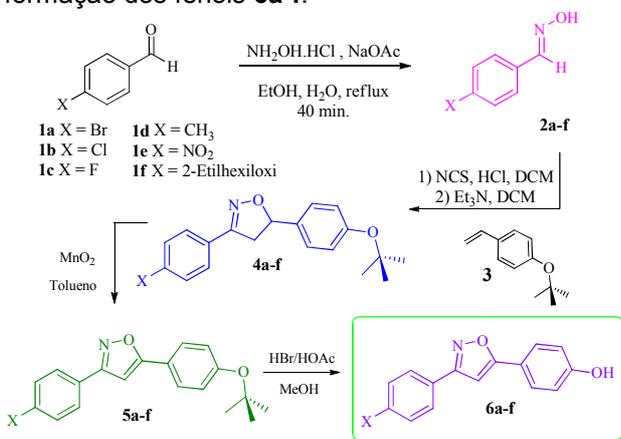
O ácido cinâmico e o isoxazol são duas unidades moleculares com características estruturas e eletrônicas distintas e com a gama de propriedades farmacológicas.¹ Na área de cristais líquidos os cinnamatos e os isoxazóis são unidades geradores de mesomorfismo.^{2,3}

Nesta comunicação informamos a síntese de uma coleção de moléculas híbridas derivadas do éster cinâmico contendo o núcleo isoxazol 3,5-dissubstituído e o correspondente comportamento líquido cristalinas dos novos materiais híbridos funcionais.

Resultados e Discussão

A estratégia para síntese dos precursores utiliza como metodologia sintética principal a cicloadição [3+2] 1,3-dipolar entre óxidos de arilnitrila e o alceno 4-*tert*-butoxiestireno (**3**) (Esquema 1). A síntese inicia com a preparação das oximas **2a-f** a partir dos aldeídos aromáticos **1a-f** por meio da reação de adição nucleofílica de hidroxilamina (95%). Na etapa seguinte, as oximas são transformadas nos correspondentes óxidos de nitrila via oxidação *in situ* pela *N*-clorosuccinimida (NCS).

A captura da espécie reativa 1,3-dipolar pelo respectivo alceno **3** produz as isoxazolininas 3,5-dissubstituídas **4a-f** (55%). As próximas etapas são a reação de oxidação das isoxazolininas aos isoxazóis **5a-f** correspondentes mediada pelo MnO₂ (95%), seguida da desproteção do grupo *tert*-butila para a formação dos fenóis **6a-f**.



Esquema 1. Esquema para obtenção dos fenóis **6a-f**.

Os fenóis **6a-f** são utilizados na síntese dos produtos finais **8a-f** por meio da reação de esterificação com o ácido **7** previamente preparado, levando à formação dos novos híbridos derivados cinamatos propriedades líquido-cristalinas. A Figura 1 mostra as texturas das mesofases obtidas.

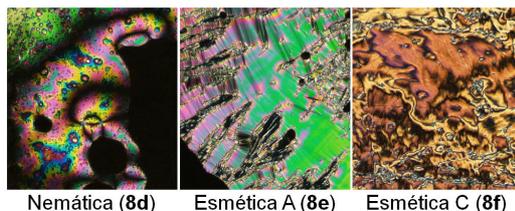
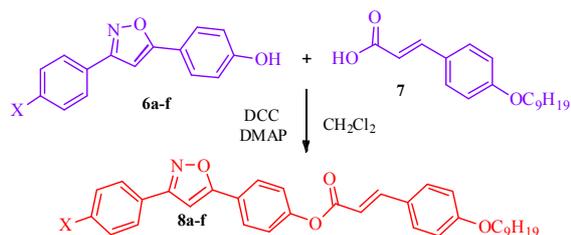


Figura 1. Reação de esterificação para síntese dos produtos finais líquido-cristalinos **8a-f** e texturas observadas por MOLP para os compostos **8d**, **8e** e **8f**.

Todos os compostos foram sintetizados estão em fase final de análise térmica. Além da investigação das propriedades mesomórficas, os cinamatos híbridos serão objetos de estudos em reações de cicloadição [2+2] (fotoquímica ou térmica).

Conclusões

As novas moléculas híbridas derivados do éster cinâmico contendo o anel isoxazol apresentaram fases líquido-cristalinas com amplas faixas de temperatura. O composto **8e** apresentou a mesofase SmA em uma faixa maior que 200°C, indicando grande estabilidade. Estes compostos, que combinam as propriedades dos ésteres cinâmicos com as características do anel isoxazol, são importantes precursores para a síntese de materiais funcionais estáveis e de baixa massa molecular em áreas de tecnologia como eletrônica, eletro-óptica e holografia.

Agradecimentos

Ao PqG-2014-FAPERGS, CAPES e CNPQ.

¹ Sharma, P. *J. Chem. Pharm. Res.* **2011**, *3*, 403.

² Kohout, M., et al. *J. Mater. Chem. C* **2013**, *1*, 4962.

³ Merlo A. A., et al. *Liq. Cryst.* **2010**, *37*, 159.