

Novas moléculas líquido-cristalinas isoxazólicas contendo grupos fenazina e imina.

Luma Fritsch* (PG), **Aloir A. Merlo** (PQ).

*lumafritsch@gmail.com

Instituto de Química, UFRGS, Av. Bento Gonçalves, 9500. Porto Alegre, RS.

Palavras Chave: Isoxazolina, Isoxazol, Fenazina, Base de Schiff, Cristais Líquidos.

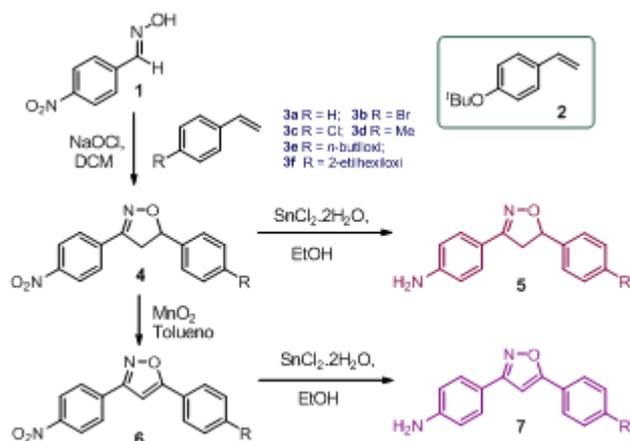
Introdução

O núcleo isoxazol devido sua planaridade, rigidez e diferença de polaridade imprime nas moléculas uma característica mesogênica latente.¹ Novos estudos, adicionando diferentes núcleos ao núcleo isoxazólico, que também possam atuar como indutores de mesofases, são sempre necessários na pesquisa de síntese orgânica direcionada para a área de materiais funcionais. Nesse sentido, os grupos fenazina e imina são boas opções de síntese. A fenazina, com um núcleo rígido π -deficiente e estrutura planar, tem um grande potencial na área de OLED's. Enquanto que a imina, que proporciona uma estrutura em degraus, mantendo a linearidade, pode trazer diferentes características comportamentais e, ainda, servir como um intermediário em reações de Diels-Alder.

Nesta comunicação informamos os resultados preliminares da síntese de novos compostos com núcleo isoxazolina **5** e isoxazol **7**, e a posterior transformação nas correspondentes fenazinas e iminas.

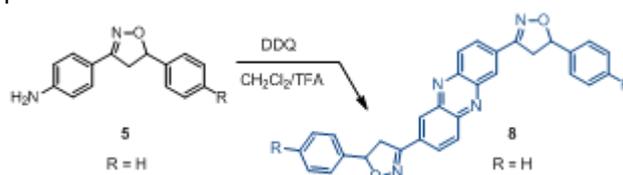
Resultados e Discussão

A rota sintética inicia-se com a preparação da isoxazolina **4**, a qual é obtida a partir da reação de cicloadição [3+2] 1,3-dipolar entre a oxima **1** e estirenos **3a-d** comerciais e **3e-f** obtidos de **2**. A segunda etapa é a oxidação da isoxazolina **4** para o isoxazol **6** via óxido de manganês (IV). A terceira etapa é a reação de redução do grupo nitro para as aminas **5** e **7**.



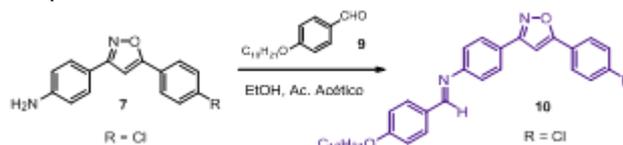
Esquema I. Síntese de isoxazolininas e isoxazóis precursores.

A isoxazolina e o isoxazol obtidos podem então ser submetidos à reação de acoplamento oxidativo², através da qual duas arilaminas se unem formando o grupo fenazina. Esta reação ocorre via radicalar, em presença de DDQ e que cuja estrutura geral **8** encontra-se representada no Esquema II. Os produtos são sólidos escuros de baixa solubilidade.



Esquema II. Síntese do núcleo fenazina.

A reação de formação do grupo imina, comumente chamada de base de Schiff, é realizada misturando-se um aldeído e uma amina aromática catalisada por ácidos de Brönsted. As moléculas finais são sólidos cristalinos que precipitam no próprio solvente da reação. Para a imina **10** (R = Cl) observou-se comportamento líquido-cristalino com uma enorme faixa de mesofase SmA com temperatura de clareamento acima de 350 °C.



Esquema III. Síntese da Base de Schiff.

A síntese completa da série das fenazinas **8a-f** e das bases de Schiff **10a-f** estão em fase final de preparação e caracterização. Para as fenazinas pretende-se avaliar o comportamento eletroquímico, mesomórfico e fotofísico. Quanto às bases de Schiff tem-se como perspectiva utilizá-las em uma reação de Diels-Alder para estudar suas propriedades morfológicas, térmicas, químicas e fotofísicas.

Conclusões

Os resultados preliminares de síntese da fenazina **8** e da base de Schiff **10** são bastante promissores para o estudo completo das duas séries e a posterior avaliação das propriedades funcionais dessas novas moléculas.

Agradecimentos

À Capes, CNPq, UFRGS e PqG-2014-Fapergs.

¹ Vilela, G. D. et al. *Tetrahedron Letters*, **2011**, 52, 6569.

² Shinokubo, K. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, 51, 10333.