

Isoxazol e PirazolRafael Levi Coelho¹ (IC), Iêda Maria Begnini^{1*} (PQ) e Luciano da Silva² (PQ) * ieda@furb.br¹Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau, Blumenau – SC, 89012-900²Universidade do Vale do Itajaí, Campus VII, São José - SC

Palavras Chave: cristal líquido, heterociclos isoxazol e pirazol.

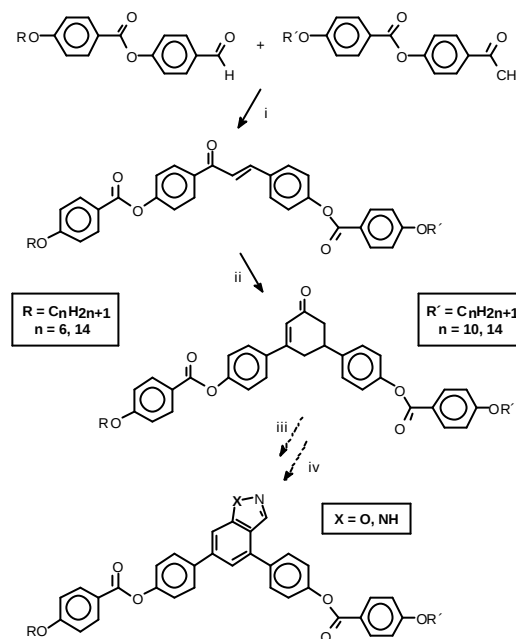
Introdução

Compostos que apresentam estados intermediários entre o sólido cristalino e o líquido isotrópico, os cristais líquidos, possuem geometria variada. O estudo da relação entre estrutura molecular e comportamento mesomórfico é um dos pontos centrais na investigação em cristais líquidos.

A fim de alterar a linearidade e polaridade do sistema, fez-se a introdução da unidade central cíclica 3,5-dissubstituída entre grupos polarizáveis, dando ao sistema forma geométrica do tipo “banana”, além da introdução de um forte momento dipolar introduzido pela carbonila ou pelo heterociclo, o que favorece a formação de mesomorfismo. Sendo assim, neste trabalho informa-se a síntese de compostos contendo os heterociclos pentagonais isoxazol e pirazol, e o estudo de suas propriedades líquido cristalinas.

Resultados e Discussão

As reações de obtenção dos compostos de interesse estão demonstradas no Esquema I. Partindo-se do ácido 4-hidroxibenzoico, numa reação de esterificação com MeOH e H₂SO₄ obtém-se o éster 4-hidroxibenzoato de metila. O mesmo é alquilado com brometos de alquila adequados (6, 8, 10, 12 e 14 átomos de carbono) em acetona e K₂CO₃ para obtenção do éster 4-alcóxibenzoato de metila que é hidrolisado com KOH em EtOH ao ácido 4-alcóxibenzoico. Este é esterificado com 4-hidroxiacetofenona ou 4-hidroxibenzaldeído para obtenção dos ésteres cetônicos e aldeídicos. Estes são condensados numa reação de Claisen-Schmidt com solução etanólica de NaOH e MeOH, para a obtenção de cetonas α,β-insaturadas, que posteriormente reagem com acetoacetato de etila e etóxido de sódio numa reação de condensação de Knoevenagel, procedida de reação de descarboxilação para formação do núcleo 3,5-dissubstituído, a enona cíclica. Na próxima etapa, a enona cíclica reagirá com formato de etila na presença de etóxido de sódio, numa condensação tipo Claisen e, em seguida, a ciclocondensação com cloridrato de hidroxilamina ou hidrazina em AcOH, fornece os heterociclos isoxazol ou pirazol, respectivamente.



i: MeOH, NaOH/H₂O; ii: Acetoacetato de Etila, NaOEt
iii: formato de etila, NaOEt; iv: NH₂NH₂ e NH₂OH.HCl.

Esquema I**Conclusões**

Todos os compostos sintetizados até então foram obtidos sem maiores dificuldades, apresentando bons rendimentos e pureza adequada, e foram caracterizados por espectroscopia de IV e RMN de ¹H e ¹³C. As etapas finais, condensação da enona cíclica com formato de etila e formação dos heterociclos isoxazol e pirazol, estão em andamento. As propriedades mesomórficas serão estudadas através de microscopia de luz polarizada.

Agradecimentos

PIBIC/CNPq e DQ-FURB.

¹ Iglesias, R.; Serrano, J. L.; Sierra, T. *Liq. Cryst.*, **1997**, 22, 37-46.

² Padmavathi, V.; Reddy, B. J. M.; Balaiah, A.; Reddy, K. V.; Reddy, D. B., *Molecules*. **2000**, 5, 1281-1286.