

5-(Hidroximetil)-3-Aril-2-Isoxazolina: Precursor Para a Síntese de MMI.

Aline Tavares¹(PG), Aloir A. Merlo^{1*} (PQ). Email: aloir@iq.ufrgs.br.

¹Instituto de Química, UFRGS, Av. Bento Gonçalves, 9500 – CEP 91501-970, Porto Alegre, RS, Brasil.

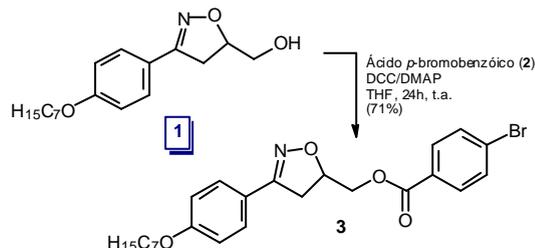
Palavras Chave: MMI, Cristal Líquido, Acoplamento de Sonogashira, 5-Hidroximetil-3-aryl-2-isoxazolina.

Introdução

Moléculas orgânicas contendo anéis heterocíclicos são utilizadas em muitas áreas do conhecimento científico, em particular na síntese de materiais moleculares inteligentes (MMI). Nesse sentido, o anel isoxazolinico tem-se revelado uma molécula com um potencial bastante atrativo para a geração de materiais sensíveis a efeitos externos.^{1,2} Além disso, compostos orgânicos com o anel isoxazolinico aparecem com frequência em muitos produtos farmacêuticos³ e agroquímicos.⁴ Nesta comunicação desejamos informar os resultados de síntese e caracterização de materiais moleculares inteligentes contendo a unidade estrutural 5-(hidroximetil)-3-aryl-2-isoxazolina.

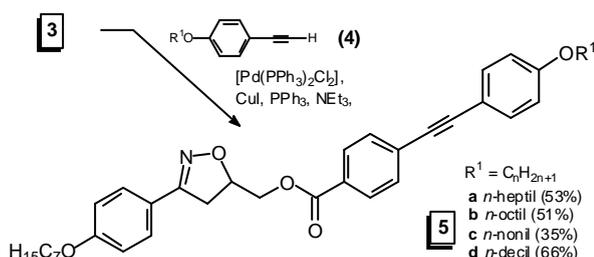
Resultados e Discussão

A 5-(hidroximetil)-3-aryl-2-isoxazolina (**1**) é o elo químico necessário para a preparação das séries homólogas nesta comunicação.⁵ A partir da reação de esterificação com o ácido **2**, (DCC/DMAP) produziu-se o éster intermediário **3**, conforme Esquema 1.



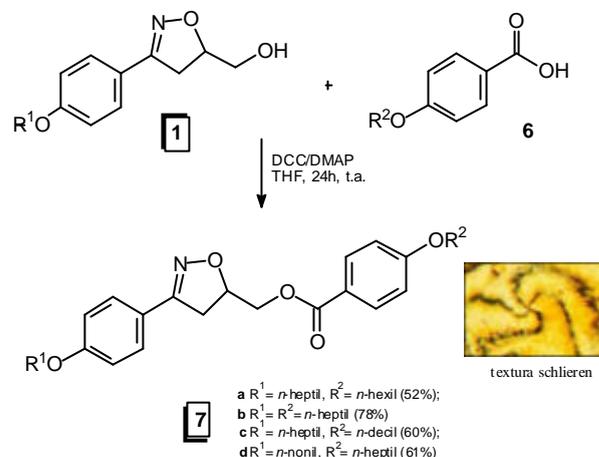
Esquema 1. Síntese do éster intermediário **3**.

Na etapa subsequente realizou-se a reação de acoplamento de Sonogashira com o alcino terminal **4** para produzir a série **5a-d**, conforme Esquema 2.



Esquema 2. Síntese de cristais líquidos **5a-d**.

O Esquema 3 descreve a preparação da segunda série de MMI **7a-d**. Na síntese desses compostos foram realizadas as reações de esterificação do composto **1** com o ácido **6** contendo diferentes substituintes na posição 4 do anel benzênico. As condições de reação foram as mesmas daquelas citadas para a série anterior.



Esquema 3. Síntese da série homóloga de cristais líquidos **7a-d**.

Os compostos das séries **5a-d** e **7a-d** foram caracterizados por microscopia óptica de luz polarizada, DSC, CHN e RMN ¹H e ¹³C. Os homólogos de ambas as séries apresentaram mesofase esméctica C (S_c) monotrópicas e com textura schlieren.

Conclusões

Os compostos pertencentes às séries **5a-d** e **7a-d** apresentaram propriedades líquido cristalinas. Os compostos da série **5a-d** apresentaram-se mais estáveis termicamente em relação aos da série **7a-d**. Por exemplo, o **7a** teve uma faixa de temperatura de ΔT = 9 °C enquanto que para o **5a** essa faixa foi de ΔT = 14 °C.

Agradecimentos

AT e AAM agradecem aos órgãos CNPq/Edital Universal **2004**; Edital MCT/CNPq **042/2006**-Projeto n° 555785/2006-8 e a UFRGS. AT agradece a CAPES pela bolsa de doutorado.

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

¹Ritter, O. M. S.; e col. *Pol. Bull.* **2006**, *56*, 549.

²Bezborodov, V.; e col. *Mol. Cryst. and Liq. Cryst.* **2004**, *411*, 1145.

³Ko, D. H.; e col. *J. Med. Chem. Res.* **1988**, *8*, 313.

⁴Imran, M.e Khan, S. A. *Indian J. of Heterocyclic Chem.* **2004**, *13*, 213.

⁵Tavares, A. Tese de Doutorado, **2006**, PPGQ – UFRGS.