

# Síntese de precursores avançados para materiais orgânicos eletrônicos (MOE) derivados de isoxazóis a partir de $\Delta^2$ -isoxazolininas.

Rafaela R. da Rosa\*<sup>1</sup> (IC), Guilherme D. Vilela<sup>1</sup> (PG), Aloir A. Merlo<sup>1</sup> (PQ).

<sup>1</sup>Instituto de Química, UFRGS, Av. Bento Gonçalves, 9500, Campus do Vale, Porto Alegre, RS, Brasil.

\* e-mail: rafaraupp@gmail.com

Palavras Chave: cicloadição [3+2] 1,3-dipolar; MnO<sub>2</sub>-oxidação, Isoxazolina-isoxazol, Óxido de arilnitrilas.

## Introdução

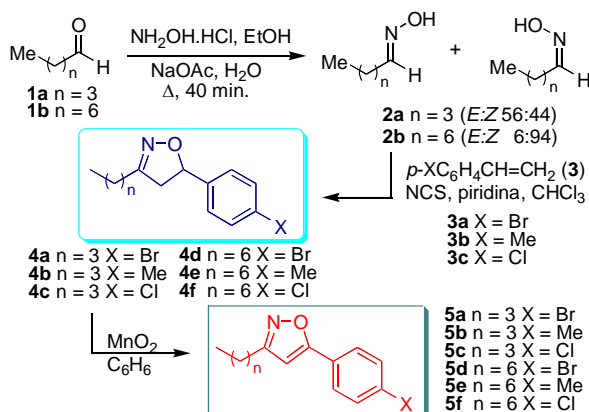
Isoxazolininas e isoxazóis são importantes heterociclos de 5 átomos presentes em muitos produtos biológicos e tecnológicos. Esses compostos “primos” mostram ampla atividade no campo da química medicinal, em síntese orgânica, bem como, na preparação de materiais líquido-cristalinos.<sup>1</sup>

Nesta comunicação, informamos a síntese de uma coleção de isoxazóis 3,5-dissubstituídos a partir das respectivas  $\Delta^2$ -isoxazolininas usando a seqüência de reação de cicloadição [3+2] 1,3-dipolar de óxidos de nitrilas seguido da reação de oxidação via MnO<sub>2</sub>. Os intermediários contendo o anel isoxazol são potenciais precursores sintéticos de materiais orgânicos eletrônicos (MOE).<sup>2</sup>

## Resultados e Discussão

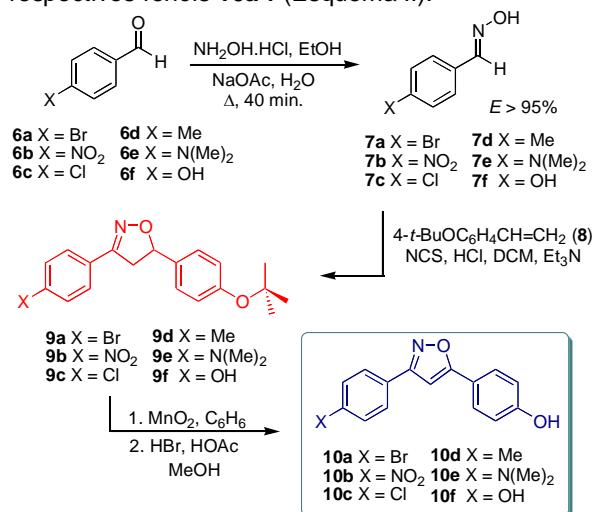
A estratégia para a síntese dos isoxazóis 3,5-dissubstituídos é esboçada no Esquema I. A etapa inicial é preparação das oximas **2a-b** a partir dos aldeídos **1a-b**, as quais são as responsáveis pela formação *in situ* do óxido de nitrila na próxima etapa da rota sintética (70%). A segunda etapa é a construção do anel isoxazolina, por meio de cicloadição [3+2] 1,3-dipolar, utilizando os estirenos **3a-c** como dipolarófilos, e as oximas alifáticas **2a-b** como geradores de compostos 1,3-dipolares.

A reação de oxidação das isoxazolininas **4a-f** para os isoxazóis **5a-f** correspondentes introduz uma ligação dupla no anel, contribuindo para o aumento da planaridade e da conjugação molecular.



Esquema I. Síntese dos compostos **4a-f** e **5a-f**.

A reação de cicloadição foi realizada com outro grupo de oximas **7a-f** e o dipolarófilo **8**. Os cicloadutos **9a-f** são importantes precursores para os fenóis **10a-f**. Após a reação de oxidação, procedeu-se à remoção do grupo protetor, utilizando-se catálise ácida, com a formação dos respectivos fenóis **10a-f** (Esquema II).



Esquema II. Síntese dos fenóis **10a-f**.

Os próximos passos serão as reações de alquilação, esterificação e reação de Sonogashira e Suzuki dos intermediários **10a-f** e **5a-f**, sendo esses intermediários precursores para a formação de compostos orgânicos na forma de fitas moleculares com potencial aplicativo na área de cristal líquido e de materiais orgânicos eletrônicos - MOE.

## Conclusões

Os resultados preliminares demonstraram a viabilidade de síntese de precursores conjugados, os quais serão utilizados em trabalhos futuros na preparação de MOE.

## Agradecimentos

À FAPERGS, à CAPES-Programa PROCAD, ao CNPQ e ao INCT-Catálise pelo apoio.

<sup>1</sup> Merlo A. A., et al. *Liq. Cryst.* **2010**, *37*, 159-169.

<sup>2</sup> Vilela, G. D., *Dissertação de Mestrado*, **2010**, PPGQuímica, UFRGS.