

Rafaela R. da Rosa\* (IC), Aloir A. Merlo (PQ), Guilherme D. Vilela (PG).

Instituto de Química, UFRGS, Av. Bento Gonçalves, 9500, Campus do Vale, Porto Alegre, RS, Brasil

\*e-mail: rafaraupp@gmail.com

## INTRODUÇÃO

A síntese de materiais orgânicos semicondutores com propriedades de cristal líquido é um campo com grande perspectiva de crescimento e aplicação na indústria eletrônica.

O objetivo desta comunicação é a síntese de intermediários avançados contendo o anel isoxazol, que são precursores sintéticos de materiais orgânicos eletrônicos (MOE). Os MOE são encontrados em diferentes aplicações eletrônicas, do tipo semicondutor orgânico, OLEDs, OFETs, LED, corantes, géis e outros.

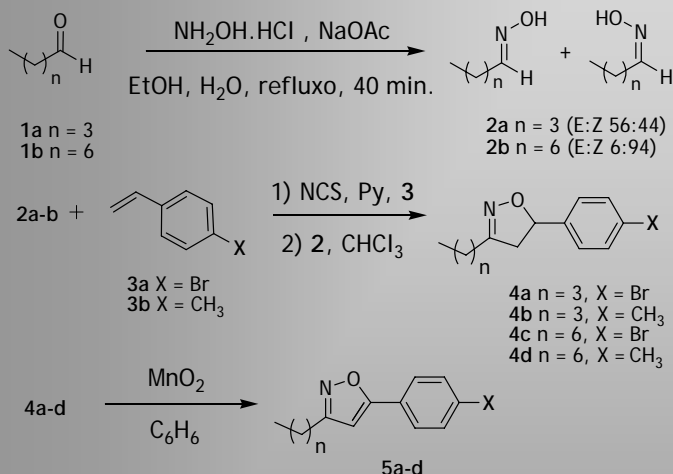
## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A estratégia para a síntese dos isoxazóis 3,5-dissubstituídos começa com a 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. Os rendimentos desta etapa ficaram em aproximadamente 70%.

Em seguida é construído o anel isoxazolina, por meio de cicloadição [3+2] 1,3-dipolar, utilizando como dipolarófilos os estirenos substituídos 3a-b e como geradores de compostos 1,3-dipolares (Óxidos de Nitrilas) as oximas alifáticas 2a-b.

A reação de oxidação das isoxazolininas 4a-d para os isoxazóis 5a-d correspondentes introduz uma ligação dupla no anel, aumentando a planaridade e a conjugação da molécula.

O esquema a seguir mostra a rota sintética utilizada e a tabela 1 os respectivos resultados.



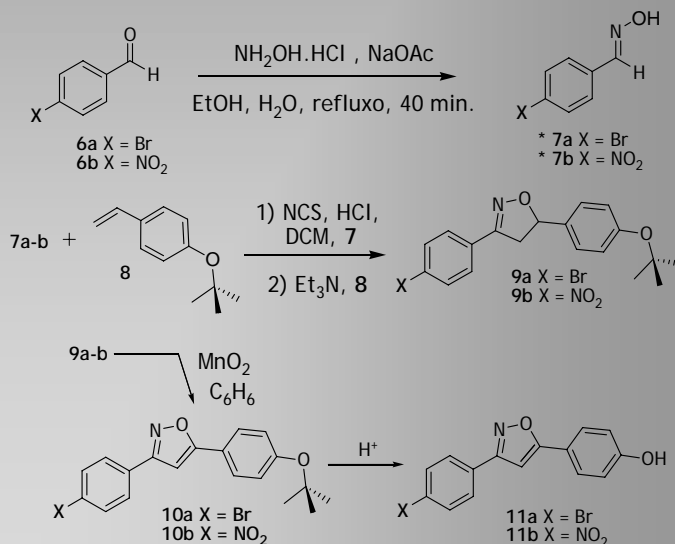
Esquema 1. Rota da síntese

Tabela 1. Resultados das isoxazolininas e isoxazóis

Isoxazolina		Isoxazol		
n°	%	n°	%	PF (°C)
4a	25	5a	48	44
4b	44	5b	89	35
4c	87	5c	70	76
4d	49	5d	72	56

A reação de cicloadição foi realizada com um outro grupo de oximas, utilizando-se *tert*-butóxiestireno como dipolarófilo.

Após a oxidação, procedeu-se à remoção do grupo protetor, utilizando-se catálise ácida.



Esquema 2. Rota da síntese

\* Proporção E:Z maior que 95:5.

Tabela 2. Resultados das isoxazolininas, isoxazóis e fenóis

Isoxazolina	n°	9a	9b
	%	51	20
	PF (°C)	122	143
Isoxazol	n°	10a	10b
	%	95	90
	PF (°C)	158	181
Fenol	n°	11a	11b
	%	99	87
	PF (°C)	206	241

## CONCLUSÃO

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

## PERSPECTIVAS

Os próximos passos serão as reações de alquilação dos fenóis e de acoplamento com os brometos, sendo esses intermediários precursores para a formação de compostos orgânicos na forma de fitas moleculares com potencial aplicativo na área de materiais orgânicos eletrônicos - MOE.

## AGRADECIMENTOS

À FAPERGS, à CAPES, ao CNPQ e ao INCT-CMN pelo fomento.

- McOmie, J. F. W., *Protective Groups in Organic Chemistry*, 1973, Plenum Press, London and New York.
- Vilela, G. D., *Síntese de Intermediários Avançados para Obtenção de Materiais Orgânicos Eletrônicos*, Dissertação de Mestrado, 2010, UFRGS.