

Greice M. dos Santos (IC)^{a,*}, Valter Stefani (PQ)^a
Instituto de Química – Departamento de Química Orgânica – UFRGS/RS
*e-mail: greice.magalhaes@gmail.com

Introdução

➔ Benzazóis são compostos heterociclos que contêm um anel azólico condensado a um anel benzênico, e que se caracterizam por apresentar absorção da radiação eletromagnética na região do ultravioleta-visível (200-800 nm);

➔ Compostos 2-(2'-hidroxifenil)benzazóis são moléculas fluorescentes, que exibem grande deslocamento de Stokes e elevada estabilidade térmica e fotofísica devido ao mecanismo de ES IPT.

➔ Apresentam inúmeras aplicações tecnológicas e industriais: sondas biológicas, corantes e pigmentos, nas áreas da análise química, médico-farmacêutica, na ciência forense, na fabricação de tintas, polímeros e materiais de alta tecnologia (fibras e tecidos, tintas de segurança, captação de energia solar e fabricação de filtros);

Objetivos

➔ Realizar a síntese de novas moléculas orgânicas do tipo hidroxifenilbenzazóis;

➔ Obtenção de produtos que apresentem um aumento da solubilidade em meios biológicos, assim como absorção da radiação em regiões espectrais específicas.

Parte Experimental

➔ Derivado monoalquilado

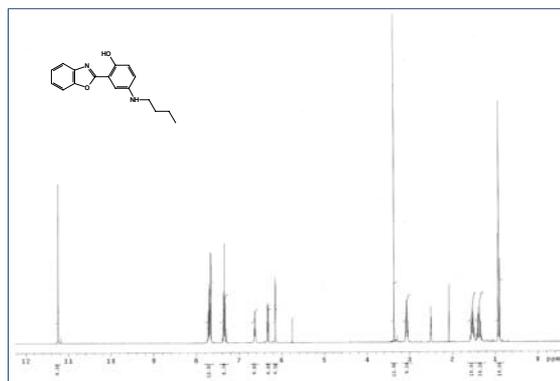
Uma solução equimolar de 2-(5'-amino-2'-hidroxifenil)benzoxazol e carbonato de potássio, em dimetilformamida (10 mL), foi agitada a 25°C por aproximadamente 15 minutos. À continuação foi adicionado iodobutano (1 mmol) e o conjunto foi aquecido a 100°C por 2h. A mistura reacional foi resfriada à temperatura ambiente e vertida sobre água gelada, o que resultou na precipitação do produto que foi filtrado à pressão reduzida e purificado por cromatografia em coluna usando diclorometano como eluente (rend: 63%).

➔ Derivado monossulfonado

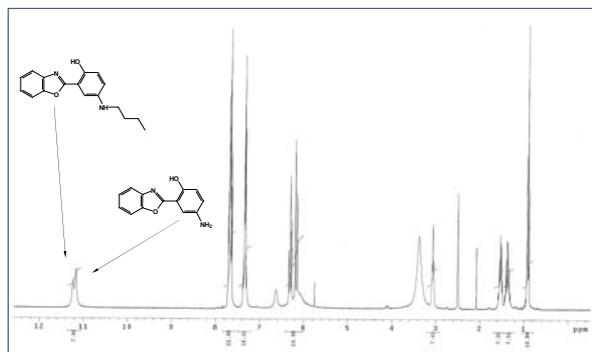
Dissolveu-se quantidades equimolares de 2-(5'-amino-2'-hidroxifenil)benzoxazol e 1,4-butanossulfona em uma mistura de isopropanol e dimetilformamida (5:1). A continuação, a reação foi aquecida a refluxo por 6h, resfriada até a temperatura ambiente e vertida sobre água gelada, o que resultou na precipitação do produto. Filtrou-se à pressão reduzida e o produto obtido foi purificado por cromatografia em coluina usando diclorometano como eluente (rend: 57%).

Resultados

Através da análise do espectro de RMN- ¹H (DMSO-d⁶) da fração cromatográfica mais pura observou-se que foi possível obter o desejado produto N-monoalquilado (R_f 0,5 em sílica e diclorometano).



Pela análise de uma segunda fração cromatográfica (2 produtos) observa-se uma mistura do produto de partida (60%) e produto monoalquilado (40%).



Na reação com a butanosulfona, obteve-se um comportamento semelhante ao observado na reação de alquilação. O produto majoritário foi obtido com um rendimento de 57 % (R_f 0,3 em sílica e diclorometano).

Encontram-se em andamento as demais análises espectroscópicas e espectrométricas.

Conclusões

➔ Foi possível a obtenção e caracterização de dois novos derivados monoalquilados do 5-amino-2-(2'-hidroxifenil)benzoxazol, com rendimentos razoáveis, após purificação por cromatografia em coluna.