

Gabriela G. da Costa (IC), Marluza P. de Abreu (PG), Leandra F. Campo (PQ)

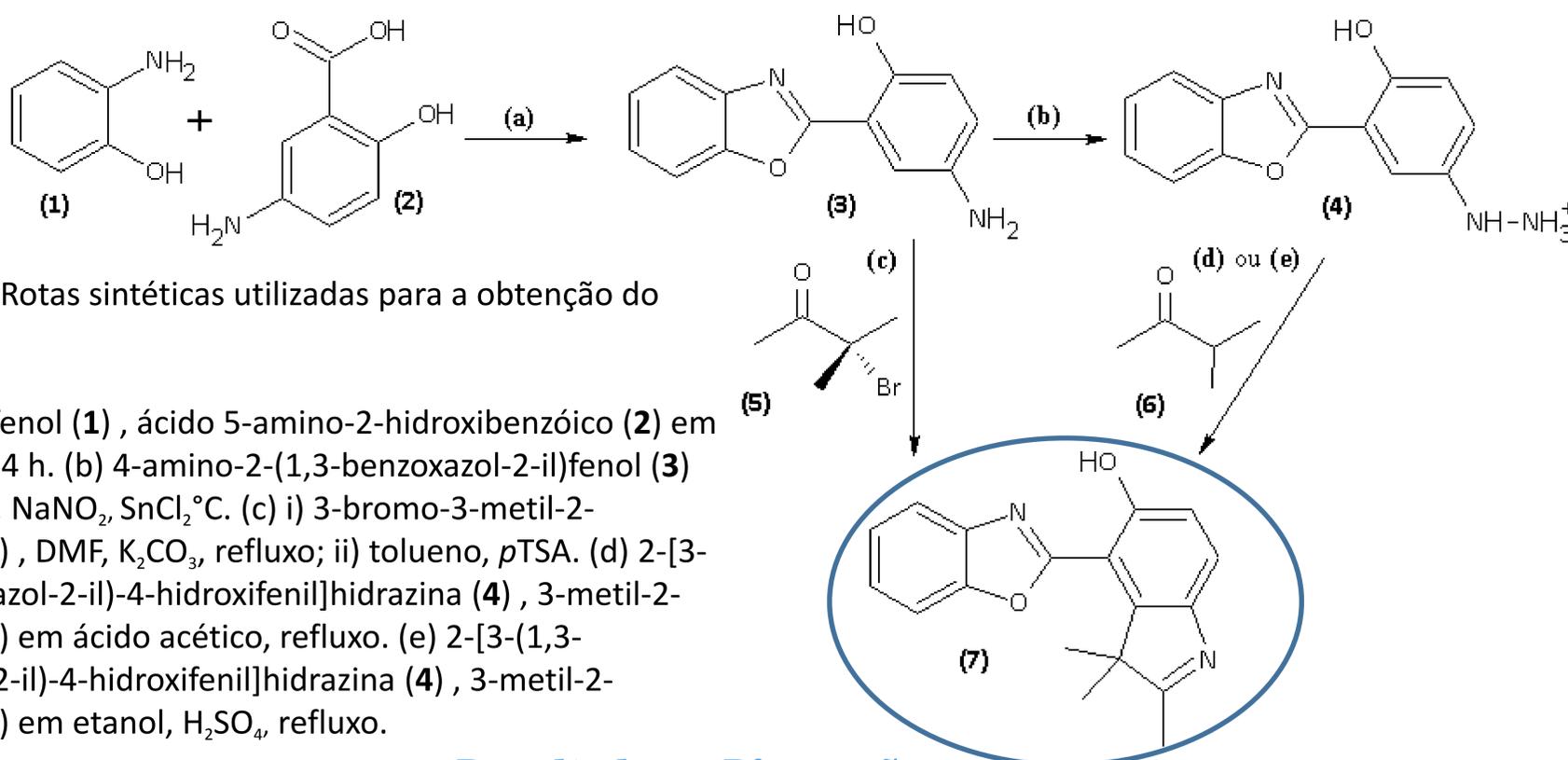
Universidade Federal do Rio Grande do Sul - Instituto de Química - Departamento de Química Orgânica

Grupo de Pesquisa em Fotoquímica Orgânica Aplicada

Introdução

Os Benzoxazolil-fenóis são uma classe importante de compostos que apresentam ESIPT (do inglês *Excited State Intramolecular Proton Transfer*), um mecanismo de emissão de fluorescência capaz de fazer com que a molécula emita luz em um comprimento de onda maior que o usual. Estes compostos podem ser aplicados em células solares, sondas fluorescentes e sensores ópticos, o que justifica a busca sempre atual por novas estruturas que emitam via ESIPT. Este trabalho mostra três rotas sintéticas diferentes para a obtenção de indóis com ESIPT (Esquema 1 rotas c,d ou e), sendo esta a primeira etapa que visa a obtenção posterior de corantes mais conjugados.

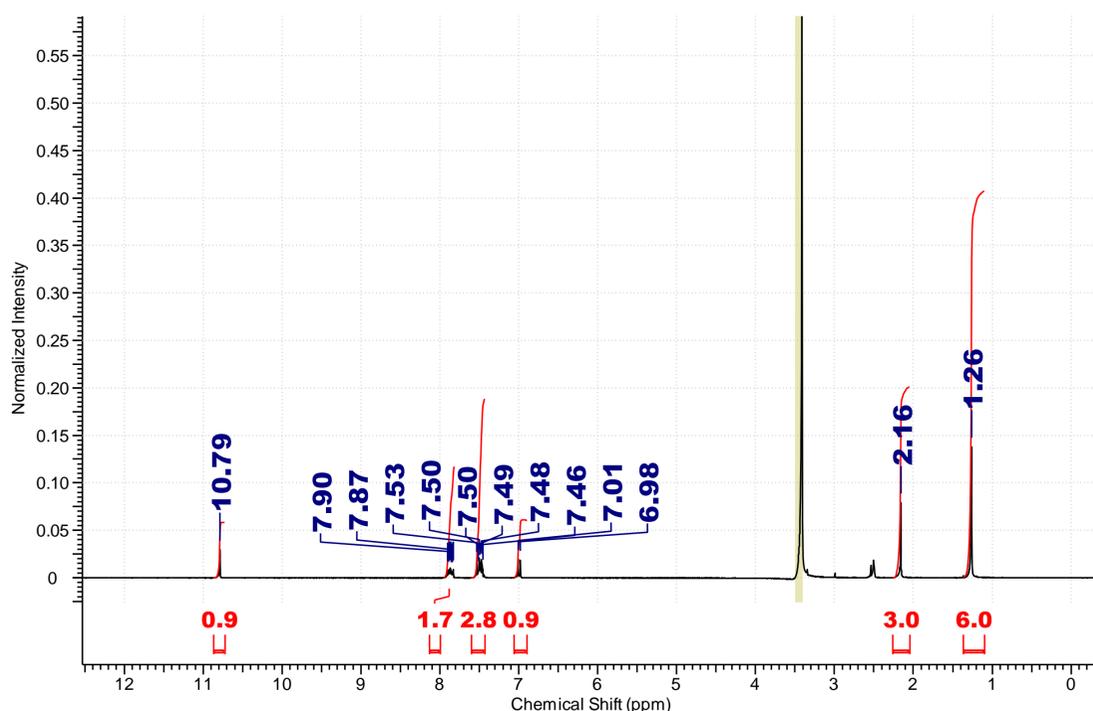
Parte Experimental



Esquema 1: Rotas sintéticas utilizadas para a obtenção do Indol **7**.

(a) 2-aminofenol (**1**), ácido 5-amino-2-hidroxibenzoico (**2**) em APF, 195 °C, 4 h. (b) 4-amino-2-(1,3-benzoxazol-2-il)fenol (**3**) em HCl/H₂O, NaNO₂, SnCl₂·C. (c) i) 3-bromo-3-metil-2-butanona (**5**), DMF, K₂CO₃, refluxo; ii) tolueno, *p*TSA. (d) 2-[3-(1,3-benzoxazol-2-il)-4-hidroxifenil]hidrazina (**4**), 3-metil-2-butanona (**6**) em ácido acético, refluxo. (e) 2-[3-(1,3-benzoxazol-2-il)-4-hidroxifenil]hidrazina (**4**), 3-metil-2-butanona (**6**) em etanol, H₂SO₄, refluxo.

Resultados e Discussão



A partir das metodologias (c), (d) e (e) pôde-se obter o produto **7**, que foi evidenciado a partir do espectro de RMN de Hidrogênio (Figura 1), com dois singletos associados às metilas em 1,26 e 2,16 ppm, dois dubletos em 7,00 ppm e 7,51 ppm, com acoplamentos *orto*, indicando a ciclização do indol conforme estrutura assinalada no Esquema 1. Além disso, espectros de ¹³C-RMN e Infravermelho estão de acordo com a estrutura.

Figura 1: Espectro de ¹H- RMN em DMSO-*d*⁶ para o indol **7**.

Conclusões

A partir das diferentes metodologias utilizadas foi possível obter e caracterizar um novo derivado que apresenta ESIPT contendo um núcleo indólico. A partir dos resultados, observou-se que o indol pôde ser obtido através de três metodologias distintas, variando a formação de subprodutos para cada metodologia da reação e, por conseguinte, o rendimento da reação.

Agradecimentos

