



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2015
<b>Local</b>	Porto Alegre - RS
<b>Título</b>	Síntese e Caracterização de Benzoxazolas Contendo Transferência Protônica Intramolecular no Estado Excitado
<b>Autor</b>	GABRIELA GAMINO DA COSTA
<b>Orientador</b>	LEANDRA FRANCISCATO CAMPO

## Síntese e Caracterização de Indóis com Transferência Protônica Intramolecular no Estado Excitado

Autor: Gabriela Gamino da Costa

Orientador: Leandra Franciscato Campo

Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

O mecanismo conhecido como ESIPT (do inglês *Excited State Intramolecular Proton Transfer*)<sup>1</sup> é uma reação de deslocamento de um próton que ocorre no estado excitado de uma molécula quando esta possui um grupo ácido e um grupo básico em proximidade. Como consequência da transferência protônica, a molécula sofre uma modificação estrutural que a faz emitir fluorescência em um comprimento de onda maior que o usual, proveniente da estrutura com o próton transferido. A espécie inicial é regenerada pela retro transferência do próton, formando um ciclo fotofísico. Uma classe importante de compostos que exhibe ESIPT são os Benzoxazol-fenóis, os quais são muito estudados em aplicações como células solares, sondas fluorescentes e sensores ópticos entre outros.

Dessa forma, esse trabalho possui como objetivo a síntese e caracterização de um novo derivado que apresenta ESIPT contendo um núcleo indólico. A parte experimental consiste na síntese do 4-amino-2-(1,3-benzoxazol-2-il)fenol, a partir de um procedimento descrito na literatura<sup>2</sup>. A obtenção do indol derivado do 4-amino-2-(1,3-benzoxazol-2-il)fenol prosseguiu de três metodologias distintas, duas delas a partir do intermediário [3-(1,3-benzotiazol-2-il)-4-hidroxifenil]hidrazina<sup>3</sup> que, variando o solvente (ácido acético ou etanol) em presença de ácido sulfúrico como catalisador e da 3-metil-2-butanona, gera o produto desejado 4-(1,3-benzoxazol-2-il)-2,3,3-trimetil-3H-indol-5-ol. Outra rota sintética alternativa para a obtenção do indol foi através da reação do 4-amino-2-(1,3-benzoxazol-2-il)fenol com a 3-bromo-3-metil-2-butanona<sup>4</sup>.

Os produtos obtidos foram purificados via coluna cromatográfica e foram caracterizados com os métodos de Ressonância Magnética Nuclear de Próton (<sup>1</sup>H-RMN), Carbono (<sup>13</sup>C-RMN) e Espectroscopia de Infravermelho. A partir dos resultados, observa-se que o indol pôde ser obtido através das três metodologias distintas, variando a formação de subprodutos para cada metodologia da reação e, por conseguinte, o rendimento da reação.

### Referências:

---

<sup>1</sup>Iglesias, R. S. Estudo Teórico-Computacional da Transferência Protônica Intramolecular em Moléculas do Tipo 2-(2'-hidroxifenil)benzazóis. Dissertação de Pós Graduação em Química UFRGS. p. 16, 1999.

<sup>2</sup>Rodembush, F. S. et al. Excited state intramolecular proton transfer in amino-2-(2'-hydroxyphenyl)benzazole derivatives: Effects of the solvent and amino group position. *Journal of Luminescence*, n. 126, p 728-734, 2007.

<sup>3</sup>Reddington, M. V. Synthesis and Properties of Phosphonic Acid Containing Cyanine and Squaraine Dyes for use as Fluorescent Labels. *Bioconjugate Chemistry*, n. 18, p. 2178-2190, 2007.

<sup>4</sup>Podgorsek, A. et al. Bromination of ketones with H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-HBr "on water". *Green Chemistry*, n. 9, p. 1212-1218, 2007.