

Guilherme Araújo * (IC), Luma Fritsch (PG), Aloir A. Merlo (PQ)

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

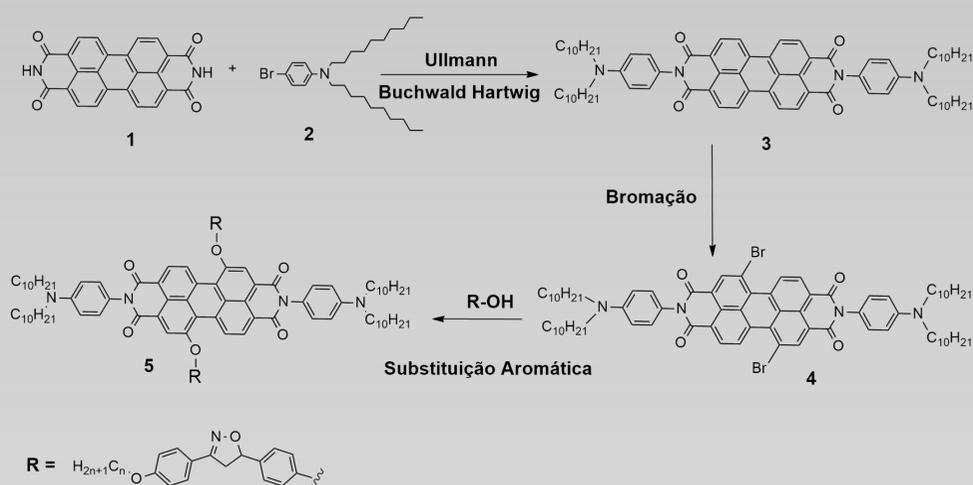
*e-mail: 00247028@ufrgs.br

INTRODUÇÃO

Os compostos com núcleo Perileno pertencem a uma família de corantes com ampla aplicação comercial e na pesquisa. A molécula é constituída por dois anéis naftalênicos fundidos. Por ter esta estrutura fortemente condensada eles possuem uma nuvem eletrônica muito densa, dispersa sob um plano rígido. Geralmente compostos com núcleo perileno apresentam propriedades eletrônicas diferenciadas já que possuem uma baixa diferença energética entre os seus orbitais HOMO e LUMO e uma alta facilidade de empilhamento por interação π -stacking. Assim, compostos com núcleo Perileno Bisimida, possuem uma alta estabilidade, porém sua solubilidade em solventes orgânicos é baixa, o que torna difícil o seu manuseio. Este trabalho apresenta a síntese de derivados do Perileno Bisimida, com modificações em sua estrutura que possibilitem uma melhor solubilidade em solventes orgânicos e melhorem suas propriedades para futuras aplicações.

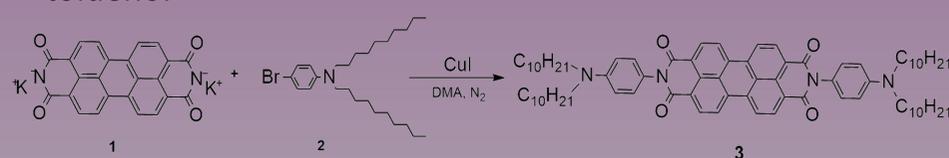
RESULTADOS E DISCUSSÃO

A rota sintética planejada inicia com a arilação do Perileno bisimida **1**, pela introdução da amina bi-caudal **2** em seus terminos gerando o composto **3**. Acredita-se que o grupo bi-caudal irá diminuir a alta interação intermolecular entre as moléculas do perileno e aumentará a solubilidade do composto. Após, será feita a reação de bromação na região da baía para obtenção do composto **4**, e assim conseguir realizar uma substituição aromática e adicionar o grupo R contendo anel isoxazolina, obtendo-se a molécula final **5**.

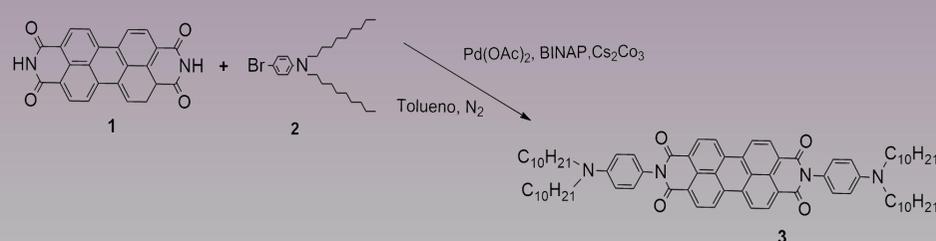


Esquema 1. Rota sintética para a formação do derivado de Perileno bisimida **5**.

Para fazer a arilação do composto **1** foram testados duas metodologias de síntese. Na metodologia de *Ullmann* onde é utilizado perileno bisimida ativado, por meio da reação de ativação com KOH, com catalisador de iodeto de cobre. O segundo modo é a reação de *Buchwald-Hartwig*, onde é feita uma reação de acoplamento cruzado com a participação do Perileno bisimida e a amina bicaudal catalisada pelo acetato de paládio(II), ligante BINAP, carbonato de cério e solvente tolueno.



Esquema 2. Reação de *Ullmann*.



Esquema 3. Reação de *Buchwald-Hartwig*.

Os resultados obtidos até então se mostram inconclusivos com relação a caracterização dos produtos em virtude da baixíssima solubilidade em $CDCl_3$. Análise de CHN serão feitas para a confirmação do produto formado. Análise térmica também mostrou-se infrutífera, considerando que as amostras degradam-se com o aquecimento.

CONCLUSÕES

Tem-se uma perspectiva de atingir o composto **3** através do Perileno Bisanidrido que reagiria com uma anilina análoga ao composto **2**. Tanto a reação de *Ullmann* quanto a de *Buchwald-Hartwig* serão melhor investigadas, porém devido a baixa solubilidade do Perileno Bismida. Os ligantes contendo grupo isoxazolina foram sintetizados separadamente.

AGRADECIMENTOS

As agências financiadoras CAPES (bolsa), CNPq – Edital Universal Proc. n. 403075/2016-5 e Fapergs

REFERÊNCIAS

- Würthner, F. *Chemical communications*, **2004**, *14*, 1564-1579.
 Rajasingh, P. *The Journal of organic chemistry*, **2007**, Vol 16, 72, 5973-5979.
 Naidu, J. J. *Bulletin of the Korean Chemical Society*, **2009**, Vol 1, 30, 224-226.
 Würthner, F. *The Journal of organic chemistry*, **2002**, Vol 9, 67, 3037-3044.
 Vilela, D. G. *Tese de doutorado*, **2014**.