



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2013: SIC - XXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2013
<b>Local</b>	Porto Alegre - RS
<b>Título</b>	Reação de Buchwald-Hartwig na síntese de novos materiais luminescentes líquido-cristalinos
<b>Autor</b>	THAÍS HELENA MACIEL FERNANDES
<b>Orientador</b>	ALOIR ANTONIO MERLO

Neste trabalho foi estudado o acoplamento de amins secundárias aos brometos aromáticos utilizando-se a metodologia de Buchwald-Hartwig. As amins secundárias utilizadas são disponíveis comercialmente, enquanto os brometos aromáticos foram sintetizados neste trabalho. Os brometos aromáticos são derivados do anel isoxazol com um padrão de substituição nos átomos de carbono C3 e C5 do respectivo anel heterocíclico. A síntese de dois tipos de 3,5-diarilisoxazóis halogenados foi feita a partir das respectivas isoxazolinias, obtidas através da reação de cicloadição [3+2] 1,3-dipolar, seguida da reação de oxidação via MnO<sub>2</sub>. A etapa inicial da rota sintética é o preparo das oximas **2a-b**, as quais são convertidas *in situ* no componente ativo 1,3-dipolar, óxido de nitrila. A segunda etapa da rota sintética é a construção do anel isoxazolina por meio da cicloadição [3+2] 1,3-dipolar, utilizando os estirenos **3a-b** como dipolarófilos, e os óxidos de nitrilas derivados das oximas **2a-b**. A reação de oxidação das isoxazolinias **4a-b** para os isoxazóis **5a-b** introduz uma ligação dupla no anel, contribuindo para o aumento da planaridade e da conjugação molecular. O grupo *tert*-butila do isoxazol **5a** é hidrolisado, gerando o respectivo isoxazol fenólico. Este é então submetido a uma reação de alquilação, gerando os compostos **5c** e **5d** - compostos com longas cadeias alquílicas visando a obtenção de propriedades líquido cristalinas nas moléculas. Por fim, realiza-se o acoplamento das amins secundárias previamente sintetizadas aos isoxazóis **5a-5d** via protocolo de Buchwald-Hartwig. O acoplamento de Buchwald-Hartwig foi realizado em atmosfera inerte de N<sub>2</sub>, 4 mol% dos catalisadores BINAP e Pd(OAc)<sub>2</sub>, 5 equivalentes de Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, 1 equivalente do substrato e 1,2 equivalentes da amina, utilizando tolueno como solvente segundo Maes, B.U.W et al., (*JOC.* **2004**, *69*, 6010-6017). Os produtos finais foram obtidos com média de 65% de rendimento e alguns desses compostos apresentaram mesofases, sendo que determinadas moléculas mostraram-se fluorescentes devido a sua extensa conjugação. A presença de mesofases dos compostos sintetizados foi verificada via microscopia ótica de luz polarizada e as moléculas sintetizadas foram caracterizadas por intermédio de técnicas espectroscópicas de ressonância magnética nuclear de hidrogênio (<sup>1</sup>H RMN) e carbono 13 (<sup>13</sup>C RMN). Análises fotofísicas para determinação do rendimento quântico e deslocamento de Stokes foram realizadas para os compostos que apresentaram fluorescência e as propriedades físicas dos compostos líquido-cristalinos foram medidas através de calorimetria explanatória diferencial (DSC). Os compostos sintetizados apresentam grande potencial aplicativo na área de dispositivos orgânicos eletrônicos.