

Thais Kazakevicius Bolzan (IC), Leandra Franciscato Campo (PQ)

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

## INTRODUÇÃO

Os corantes polimetínicos apresentam em sua estrutura uma cadeia de átomos de carbono com hibridização  $sp^2$  constituindo um sistema de ligações  $\pi$  conjugadas ligando dois grupos terminais que podem ser iguais (simétricos) ou diferentes (assimétricos).

Em virtude de suas propriedades espectroscópicas, que vão desde o visível até o infravermelho próximo (NIR, 650-900 nm), esses compostos têm diversas aplicações tais como sondas fluorescentes, células solares sensibilizadas por corantes, agentes antitumorais e antibacterianos e agentes de imagem na região do infravermelho próximo em sistemas biológicos.

## METODOLOGIA

Inicialmente, foi realizada a síntese dos precursores benzazólicos que consiste na condensação entre o ácido 3-aminobenzóico e uma anilina orto-substituída em ácido polifosfórico. Após o término da reação, o bruto reacional foi tratado e seco.

Na segunda etapa, houve a preparação do reagente *de Vilsmeier Haack*, que ao reagir com a ciclohexanona deu origem ao sal de imínio utilizado como espaçador nas moléculas de interesse. Ao final do processo, foram adicionados os precursores preparados anteriormente, gerando os heterocícos benzazólicos contendo a cadeia polimetínica (**1-3**, Fig.1).

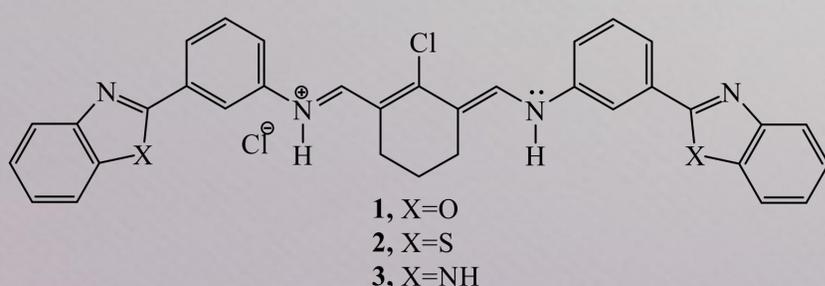
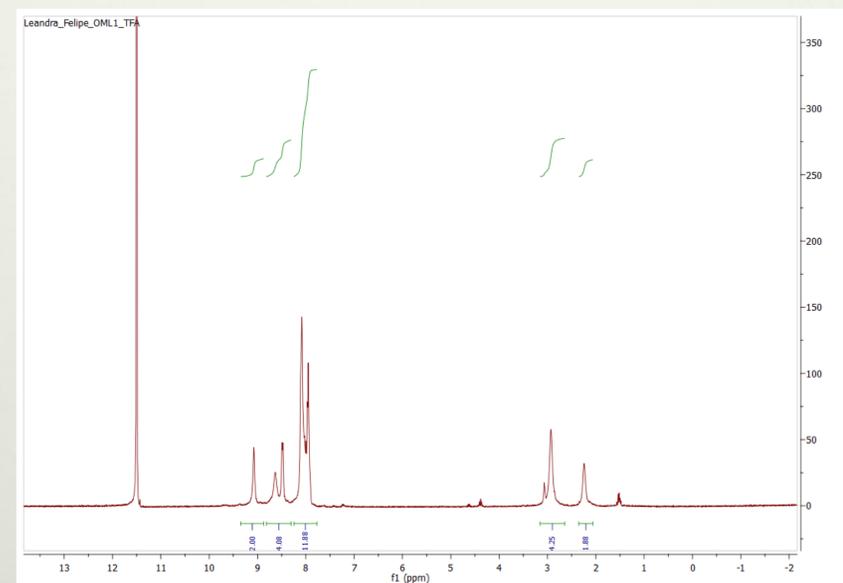


Figura 1: Estrutura dos corantes polimetínicos

## RESULTADOS

Os benzazóis utilizados como precursores foram sintetizados com rendimentos de 75%, para o 2-(5'-aminofenil)benzoxazol, 90% para o 2-(5'-aminofenil)benzoxazol e de 76% para o 2-(5'-aminofenil)benzimidazol.

A segunda parte da rota sintética envolveu maior manipulação e métodos de purificação, devido à sua complexidade. As cianinas **1** e **2** foram obtidas com rendimentos de 90% e 85%, respectivamente. No entanto, não foi possível realizar a purificação e caracterização da cianina **3**, sendo necessários futuros estudos acerca do método.



Espectro de  $^1\text{H}$ -RMN da cianina 1 em TFA (300 MHz)

## CONCLUSÕES

Através deste projeto foi possível obter três novos corantes polimetínicos do tipo cianinas. Os espectro de RMN dos precursores benzazólicos e das cianinas **1-2** comprovaram o sucesso da metodologia sintética envolvendo o reagente *de Vilsmeier Haack* e os heterocícos benzazólicos aminados. Para a caracterização estrutural da cianina contendo o heterociclo benzimidazol são necessárias mais etapas de purificação que estão em andamento.