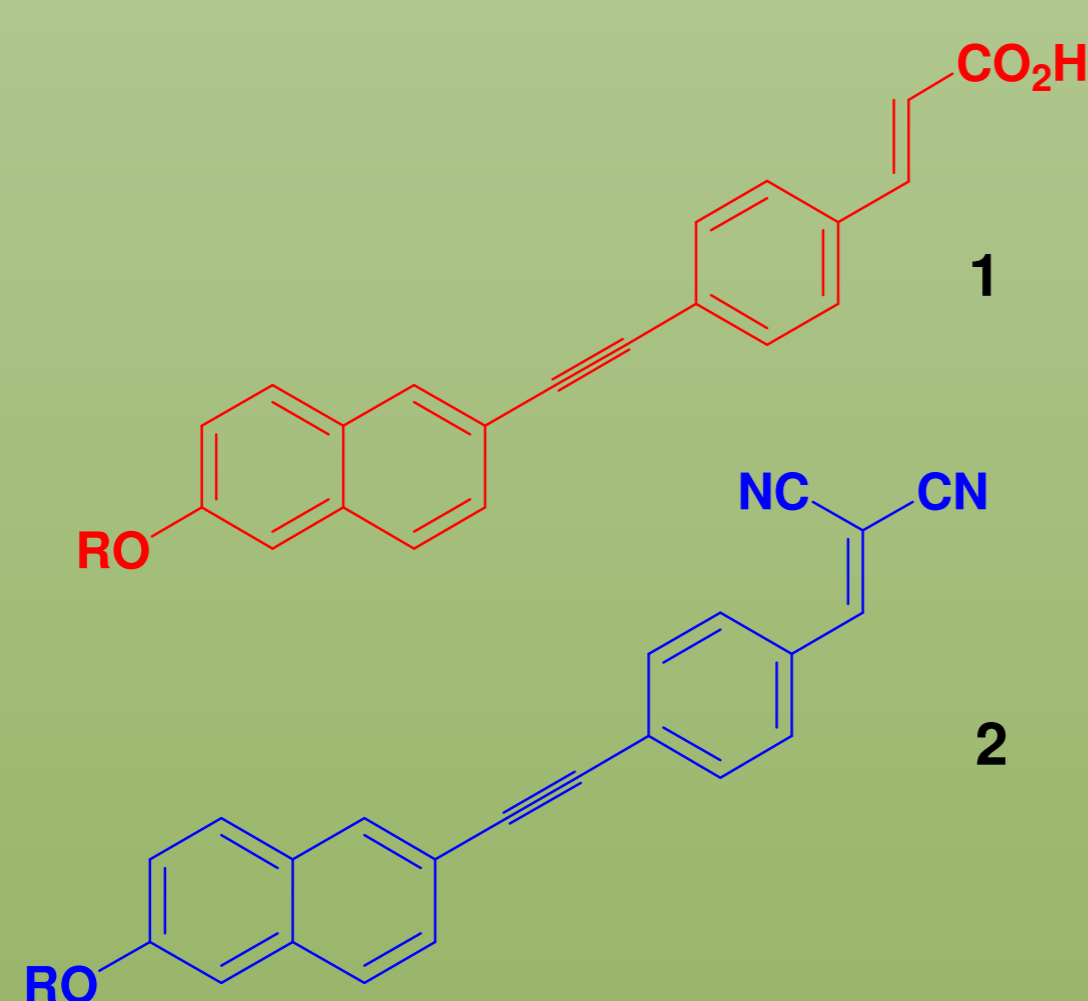


## INTRODUÇÃO

A busca por novos materiais orgânicos que possuam propriedades líquido-cristalinas é de grande importância do ponto de vista científico e tecnológico. Esses materiais abrangem uma grande variedade de estruturas com amplas aplicações tecnológicas<sup>1,2</sup> como: células solares, corantes, cristais líquidos, fotocondutores, etc.

O presente trabalho tem como objetivo a síntese de intermediários orgânicos derivados do ácido cinâmico e também moléculas que apresentem o grupo nitrila, do tipo **1** e **2**. As reações chave para a síntese dos compostos finais incluem a reação clássica de um aldeído com ácido malônico, chamada de reação de Knoevenagel e a reação de Sonogashira.

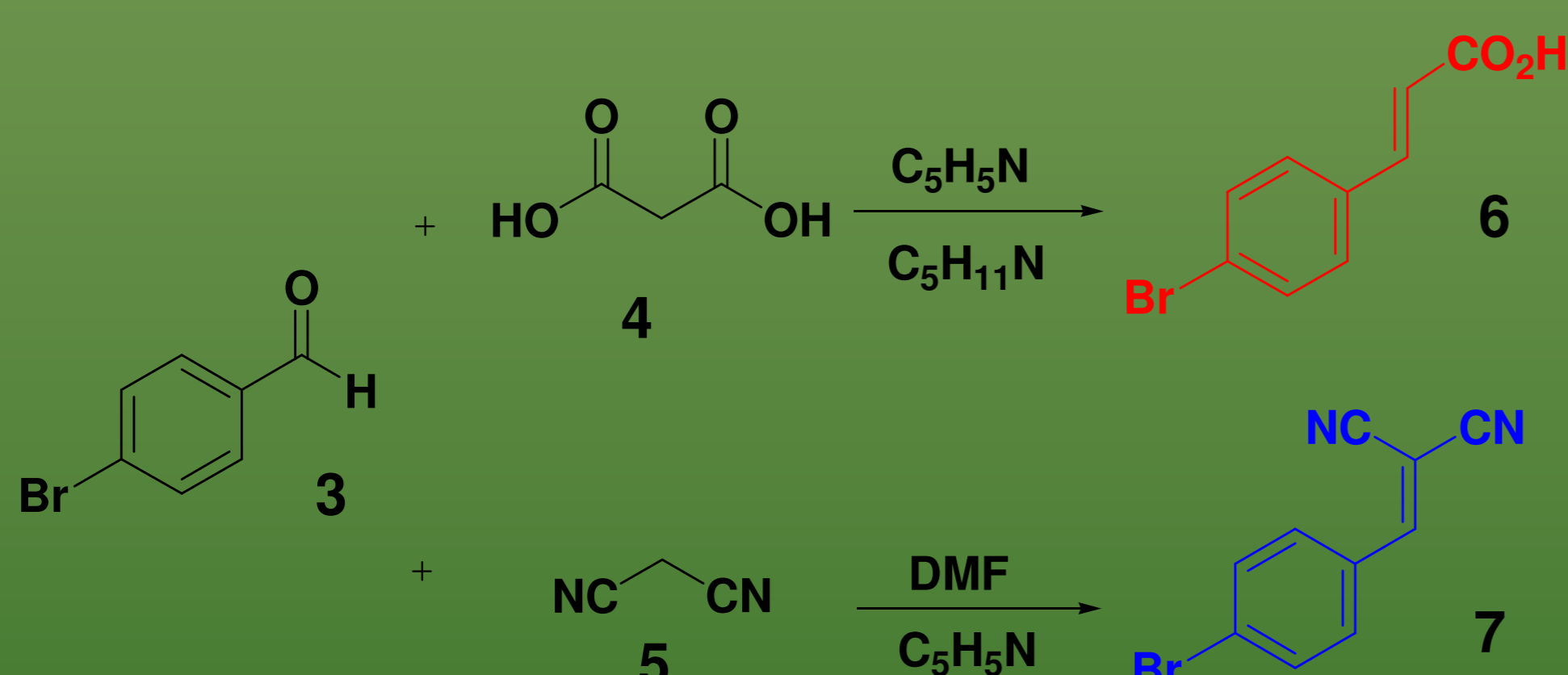


**Figura 1:** Estrutura molecular proposta para derivados cinâmicos **1** e derivados da malonitrila **2**.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

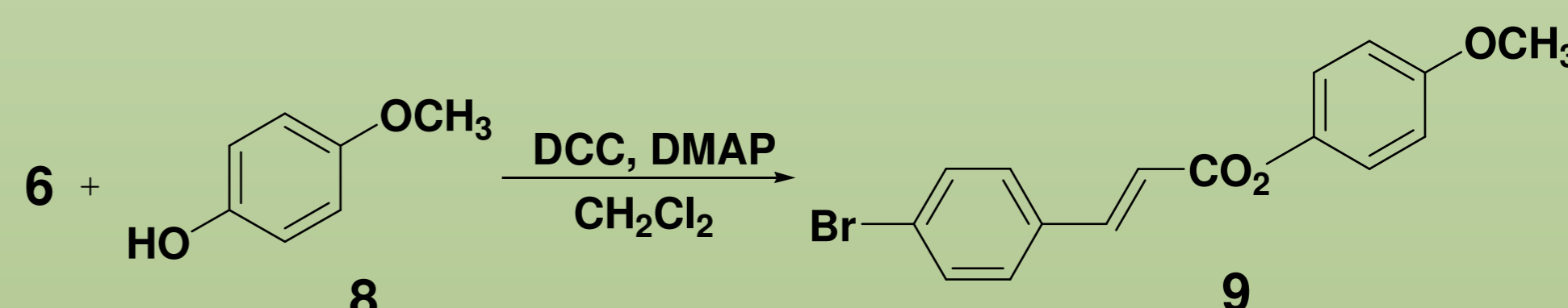
A rota sintética proposta consiste de 4 etapas: reação de Knoevenagel, esterificação, Sonogashira e desproteção. As reações foram executadas na seguinte ordem:

i. *reação de Knoevenagel*: em um balão equipado com condensador de refluxo, foram adicionados o aldeído **3**, o ácido malônico **4** e a piridina, na respectiva proporção molar de 1:2,2:5,6 e piperidina (10 mol%), levando à formação do ácido **5** (70-80%). A reação do derivado da malonitrila foi feita em *N,N*-dimetilformamida como solvente, com o aldeído **3**, malonitrila e piridina, na proporção molar 1:1,1:0,8, respectivamente (R=70%), de acordo com o Esquema 1:



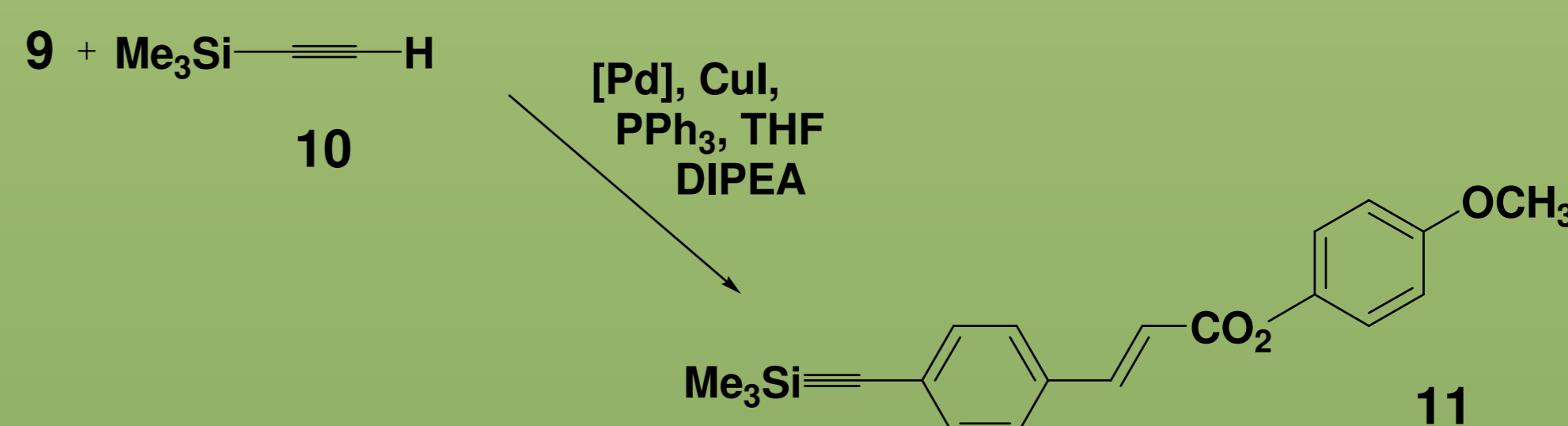
**Esquema 1:** Reação de Knoevenagel entre **3** e **4**, **3** e **5**.

ii. *reação de esterificação*: Os derivados cinâmicos anteriores foram submetidos a uma reação de esterificação com 4-metoxifenol em diclorometano em atmosfera inerte e catalisada por DMAP (Esquema 2) (R=45%).



**Esquema 2:** Reação de esterificação entre o derivado cinâmico **6** e o álcool **8**.

O produto **9** é um intermediário versátil pois a partir dele pode-se seguir uma reação de acoplamento Suzuki, no qual ligam-se dois núcleos aromáticos por uma ligação simples ou, ainda, pode-se formar um alcino através de uma reação de Sonogashira. A terceira reação importante é a *reação de Sonogashira*: Consistiu na reação entre o composto halogenado **9** e o alcino **10**, conforme o Esquema 3:



**Esquema 3:** Reação de Sonogashira.

Após essa etapa é feita uma reação de desproteção que formará uma ligação tripla terminal no éster **9** a qual servirá como ligação com outros grupos aromáticos através de outra reação de Sonogashira. Essa futura reação terá o objetivo de síntese de moléculas em forma de bastão com anisotropia geométrica e tendência a apresentar comportamento mesomórfico. Todos os materiais sintetizados foram caracterizados por RMN de <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C e Infravermelho.

## CONCLUSÕES

A síntese de novos materiais orgânicos derivados do ácido cinâmico é uma área promissora tratando-se da versatilidade dos compostos formados, por exemplo, como o éster **9**, nas áreas científica e tecnológica.

Agradecimentos:



PIBIC-CNPq-  
UFRGS

Referências:

- [1] Yong Qian, Hong-Jia Zhang, Hao Zhang, Chen Xu, Jing Zhao, Hai-Liang Zhu; *Bioorganic & Medicinal Chemistry* 18 (2010) 4991–4996.  
[2] S.M. Kelly; M. O'Neill; *Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices* (2001) 1-66 .