

# Síntese e caracterização de novos derivados benzoxazol e naftoxazol

Thainá Marques da Costa; Dione Silva Corrêa; Centro de Pesquisa em Produto e Desenvolvimento; Universidade Luterana do Brasil

## Introdução

Compostos orgânicos benzazóis têm mostrado importância medicinal e são usados em programas de descoberta de medicamentos. Os derivados 2-(2'-hidroxifenil)benzoxazol se destacam por apresentarem transferência protônica intramolecular no estado excitado (ESIPT) (fig. 1), proporcionando propriedades fotofísicas importantes, como elevada estabilidade térmica, fotoquímica e fluorescência com substancial desvio para comprimentos de ondas maiores, sendo aplicados como sondas fluorescentes e corantes a laser. Estudos recentes indicam que benzoxazol sulfonamidas apresentam elevada atividade antioxidante e biológica em vários graus. Este projeto visa sintetizar e caracterizar novos derivados do benzoxazol e naftoxazol.

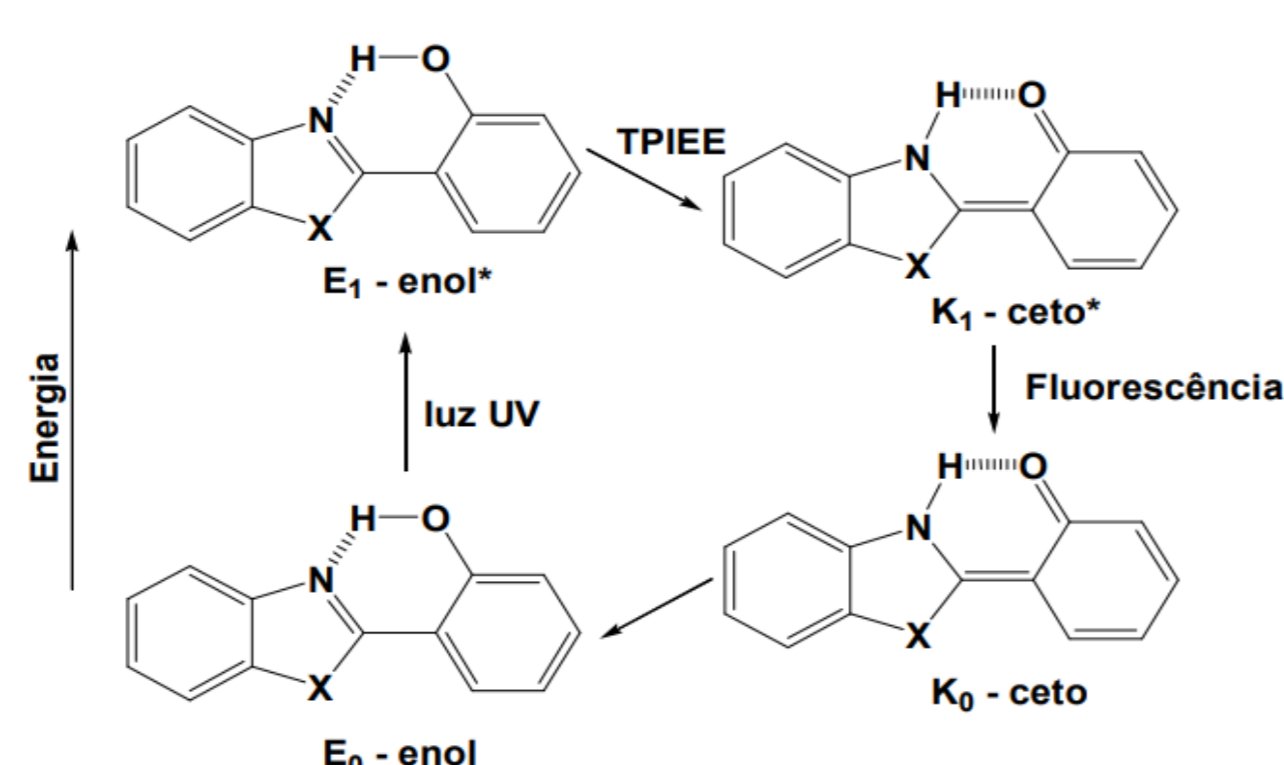


Figura 1. Mecanismo ESIPT. Fonte: CAMPO, L. F., 2003.

## Metodologia

- O composto ácido-2-(2'-hidroxifenil)naftoxazol-4-sulfônico foi obtido a partir do ácido salicílico e ácido 1-amino-2-hidroxi-naftaleno-4-sulfônico em APF, aquecido sob agitação por 5h a 180 °C.
- O ácido-2-(5'-amino-2'-hidroxifenil)benzoxazol-6-sulfônico foi obtido através da reação do ácido 5-aminosalicílico com o ácido 3-amino-4-hidroxibenzenossulfônico em APF, aquecido sob agitação por 4h a 160 °C.
- O composto 2-(5'-p-cinâmico sulfonamida-2'-hidroxifenil)benzoxazol foi sintetizado empregando o 2-(5'-amino-2'-hidroxifenil)benzoxazol com o ácido-3-(4-clorofenilsulfonil)prop-2-enoico, diclorometano e piridina, aquecido sob agitação por 1h a 40 °C.
- Purificação: por cromatografia em coluna, utilizando diclorometano como eluente, recristalização e trituração com acetona.
- Os compostos sintetizados foram analisados por espectroscopia de absorção e emissão no UV-vis.

## Resultados e Conclusões

O ácido 2-(2'-hidroxifenil)naftoxazol-4-sulfônico apresentou máximo de absorção em 262 nm e coeficiente de absorvidade molar ( $\epsilon_{262}$ )  $1,54 \times 10^4 \text{ mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ , fluorescência azul e deslocamento de Stokes de 50 nm. O Ácido 2-(5'-amino-2'-hidroxifenil)benzoxazol-6-sulfônico apresentou máximo de absorção em 300 nm e coeficiente de absorvidade molar ( $\epsilon_{300}$ ) de  $1,25 \times 10^4 \text{ mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ , fluorescência verde e deslocamento de Stokes de 73 nm. O ponto de fusão obtido foi 270 °C com decomposição. O ácido 2-(5'-p-cinâmicosulfonamida-2'-hidroxifenil)benzoxazol apresentou máximo de absorvância em 288 nm e coeficiente de absorvidade ( $\epsilon_{288}$ )  $3,39 \times 10^4 \text{ mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ , fluorescência verde e seu deslocamento de Stokes foi 109 nm. O ponto de fusão obtido foi 176 °C.

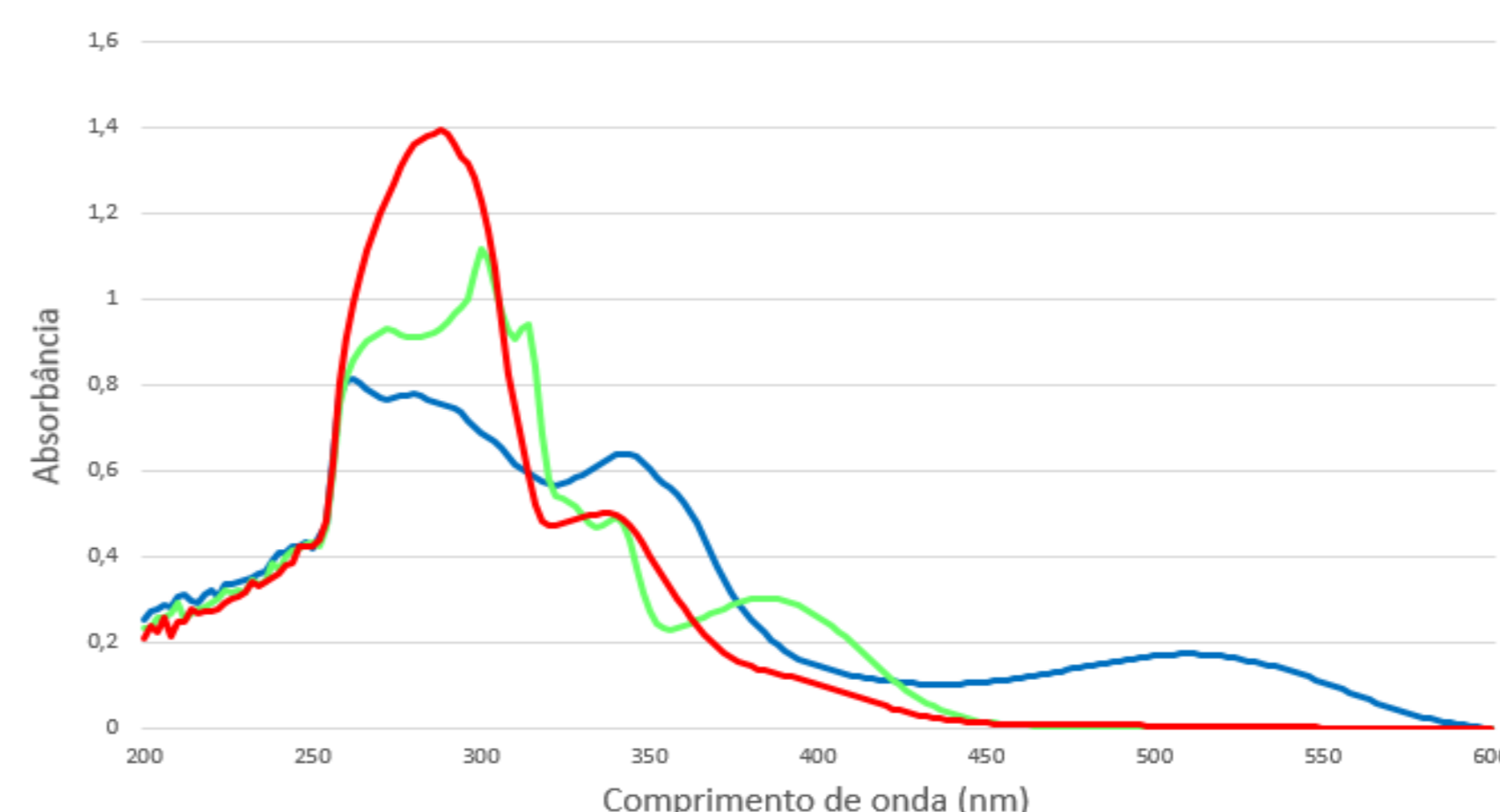


Figura 2. Espectros de absorção UV-Vis dos compostos 2-(2'-hidroxifenil)naftoxazol-4-sulfônico (linha azul), 2-(5'-amino-2'-hidroxifenil)benzoxazol-6-sulfônico (linha verde) e 2-(5'-p-cinâmicosulfonamida-2'-hidroxifenil)benzoxazol (linha vermelha).

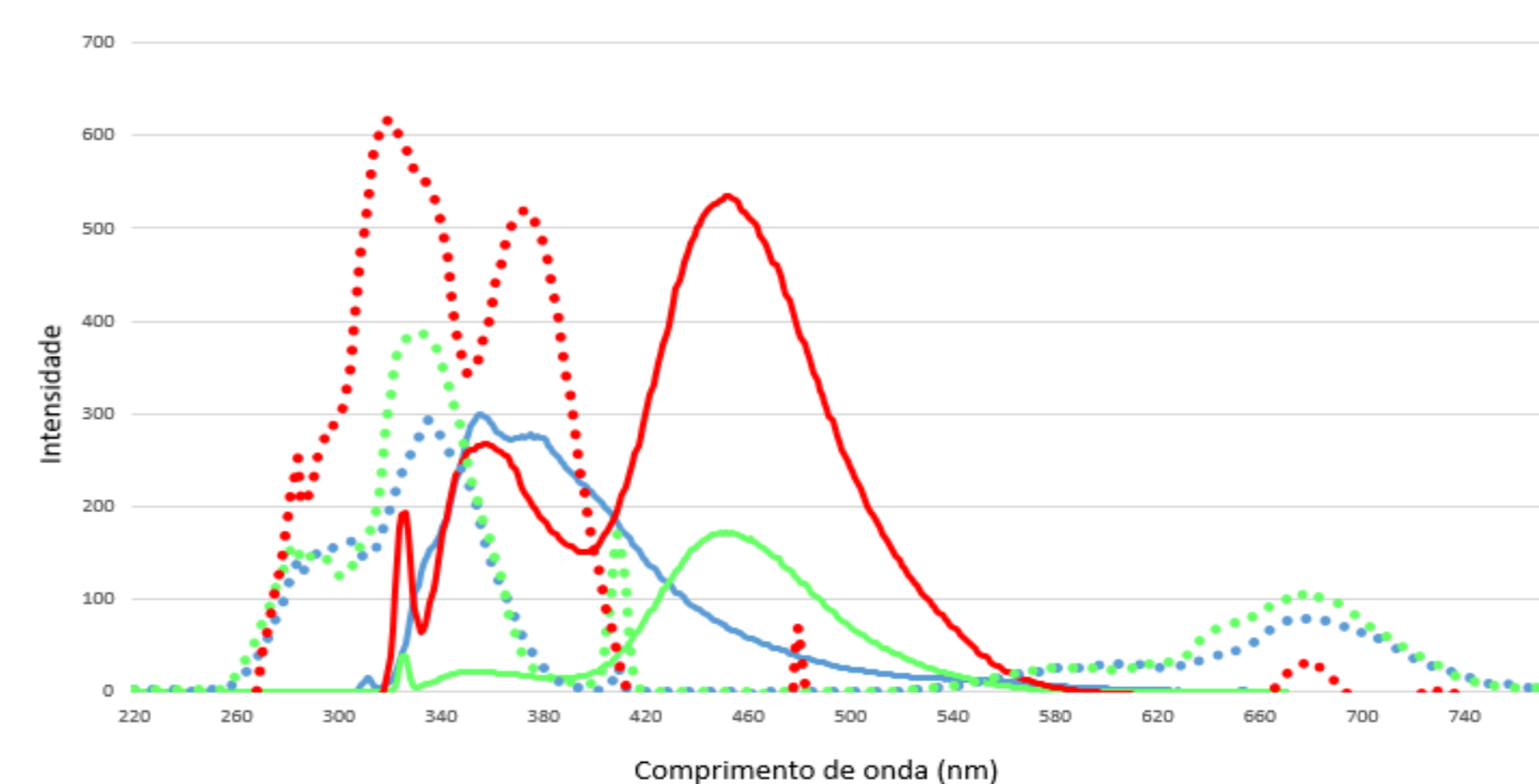


Figura 3. Espectros de emissão (linha sólida) e excitação (linha pontilhada) dos compostos 2-(2'-hidroxifenil)naftoxazol-4-sulfônico (linha azul), 2-(5'-amino-2'-hidroxifenil)benzoxazol-6-sulfônico (linha verde) e 2-(5'-p-cinâmicosulfonamida-2'-hidroxifenil)benzoxazol (linha vermelha).

Os resultados parciais obtidos demonstraram que as novas moléculas apresentam intensa fluorescência, máximo de absorção na região UV-Vis entre 260 e 300 nm e o coeficiente de absorvidade superior a  $10^4$ , o que indica que os mesmos têm alta capacidade de absorver luz na região UV-Vis. Um único sinal presente nas placas de CCD indicam que os produtos obtidos estavam puros. Os mesmos serão caracterizados por RMN e espectrometria de massas. Embora encontre-se na literatura muitos trabalhos sobre heterociclos benzazólicos, ainda há muito para ser investigado tanto sintética quanto biologicamente. Estudos deverão ser realizados para otimizar a síntese de naftoxazóis e seus derivados.

## Referências

- [1] DE OLIVEIRA, K. N. síntese, caracterização e avaliação biológica de sulfonamidas e sulfonilidrazonas. 2005. 129 p. Dissertação (Mestrado em Química) – Universidade Federal de Santa Catarina.
- [2] CAMPO, L. F. síntese de materiais fotossensíveis baseados em corantes fluorescentes como meio ativo para dispositivos ópticos. 2003. 202 p. Tese (Doutorado em Química) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- [3] Ozlem Temiz-Arpaci. *et al*: Synthesis and biological activity of some new benzoxazoles; European Journal of Medicinal Chemistry 43 (2008)

## Agradecimentos

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq e a Universidade Luterana do Brasil – ULBRA.