

Síntese e caracterização de cristais líquidos polares contendo os núcleos isoxazolina e isoxazol

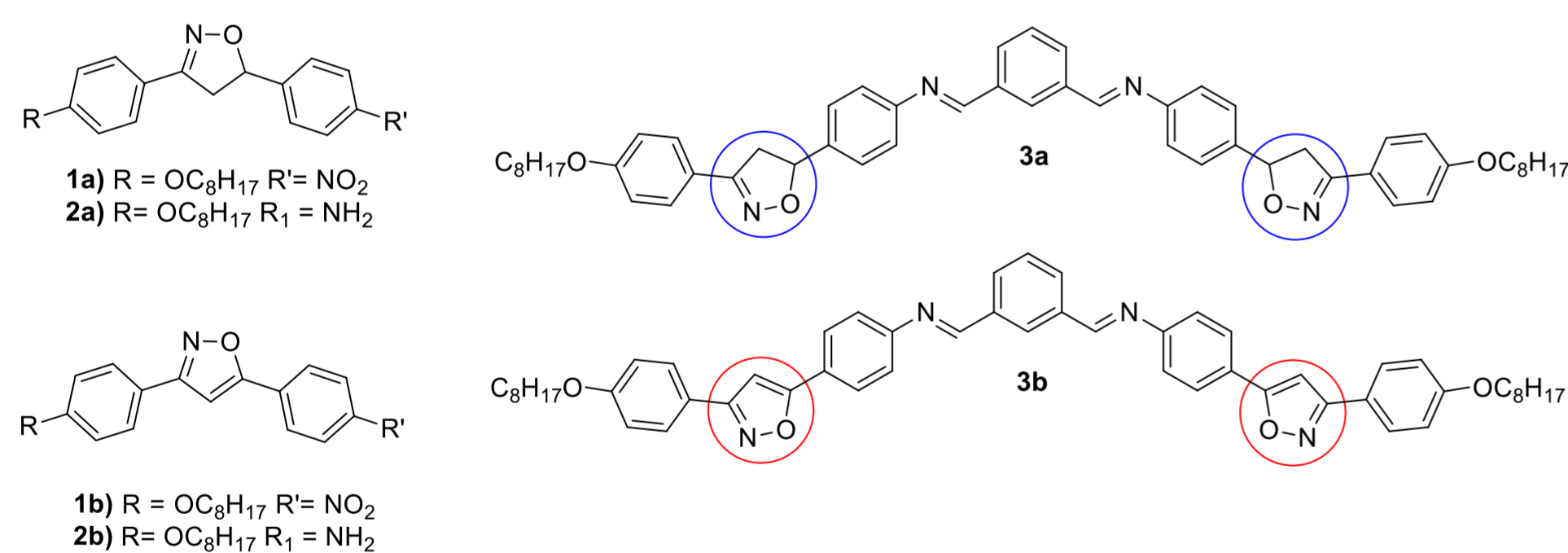
Caroline Sabrina Batista Weber*, Aloir Antonio Merlo
Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul
*caroline.weber@ufrgs.br

INTRODUÇÃO

A preparação de novos materiais líquido-cristalinos é bastante importante do ponto de vista do desenvolvimento tecnológico, uma vez que esses materiais podem apresentar uma rápida resposta eletro-óptica quando estimulados por um campo elétrico externo. Os cristais líquidos banana são uma interessante classe desses materiais que podem apresentar características físicas como ferro e antiferroeletricidade. Essas estruturas podem ter resposta eletro-óptica ainda maior que determinados tipos de materiais mesomórficos, uma vez que a forma que essas moléculas possuem podem induzir mesofases polares. Por esse motivo, a síntese e a caracterização desses compostos é de importância para aplicação dessas moléculas em dispositivos eletrônicos.

EXPERIMENTAL

Visando a obtenção de moléculas banana com comportamento líquido-cristalino, foram sintetizadas duas iminas finais (**3a** e **3b**). A rota sintética contou com a preparação do intermediário isoxazolina (**1a**), obtido através da reação de cicloadição [3+2] 1,3-dipolar. A partir do núcleo isoxazolina, o núcleo isoxazol (**1b**) foi preparado através da reação de oxidação. Ambos os compostos (**1a** e **1b**), foram reduzidos para obtenção das respectivas aminas (**2a** e **2b**). As iminas foram obtidas através da reação de **2a** e **2b** com aldeído isoftálico, sob catálise ácida.



RESULTADOS

A partir das texturas obtidas por MOLP foi possível perceber que dois intermediários apresentaram comportamento líquido cristalino (**1b** e **2b**), ambos do tipo SmA. Para o composto **1b** observou-se ainda uma transição do tipo SmA → CrE. Mesmo abaixo da temperatura ambiente a mesofase CrE permanece no composto, o que foi comprovado através do termograma de DSC de **1b**.

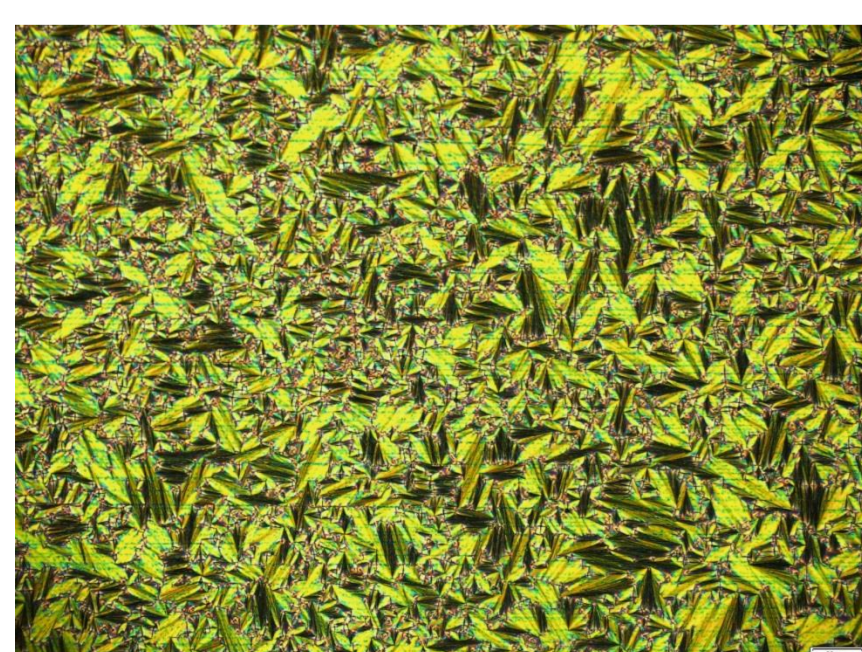
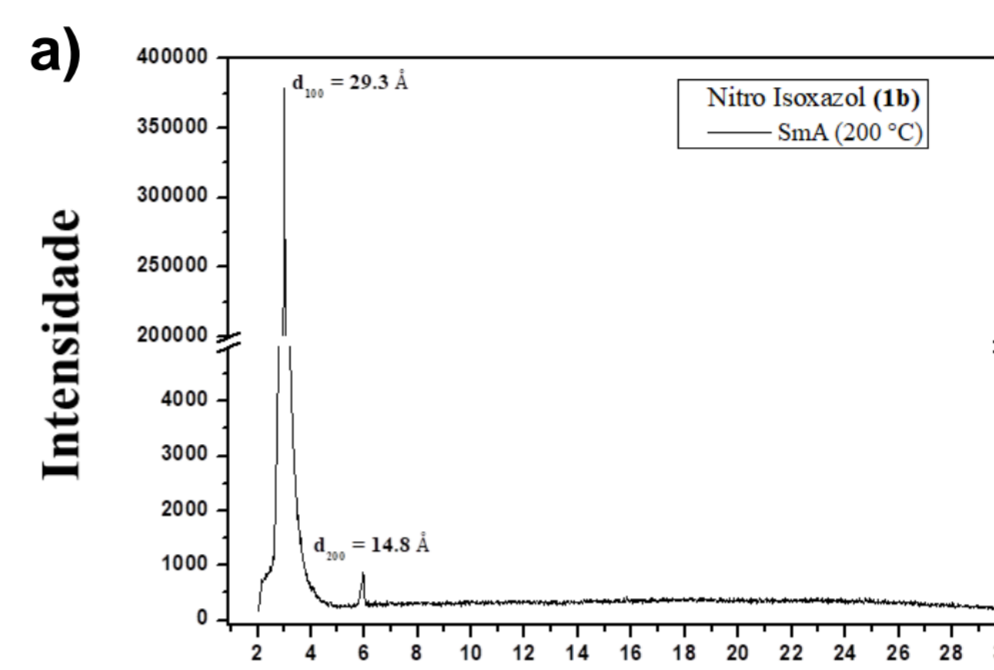


Figura 1. Textura **1b** obtida em 194°C com amostra alinhada (10°C/mim). Mesofase SmA.

Ainda, análise de difração de raios-x foi realizada para esse composto, onde foi possível perceber através da indexação dos picos do difratograma e do cálculo do comprimento molecular do composto (25,3 Å) uma relação de interdigitação das moléculas em uma mesma camada, o que pode ser melhor visualizado através do modelo apresentado na Figura 2.



20

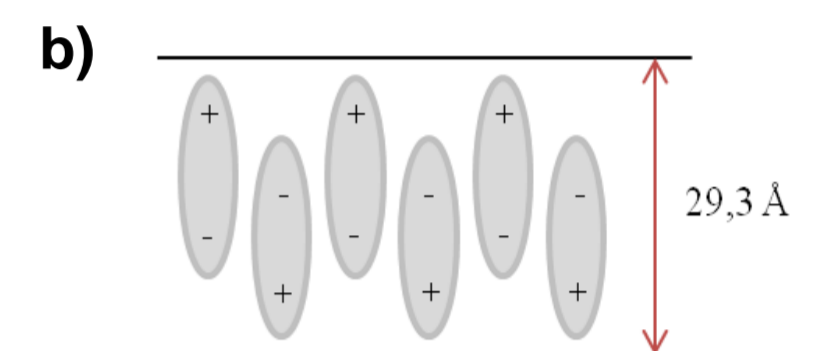


Figura 2. a) Difratograma do composto **1b** e b) Representação dos quadrupolos elétricos.

A imina **3b** apresentou comportamento do tipo banana (mesofase B7). Através das texturas obtidas por MOLP foi possível supor que a mesofase apresentava tal arranjo estrutural. Porém, o composto ainda foi caracterizado por DSC, difração de raios-x e voltagem triangular (apresentando comportamento antiferroelétrico e polarização espontânea de 126 nC/cm²).

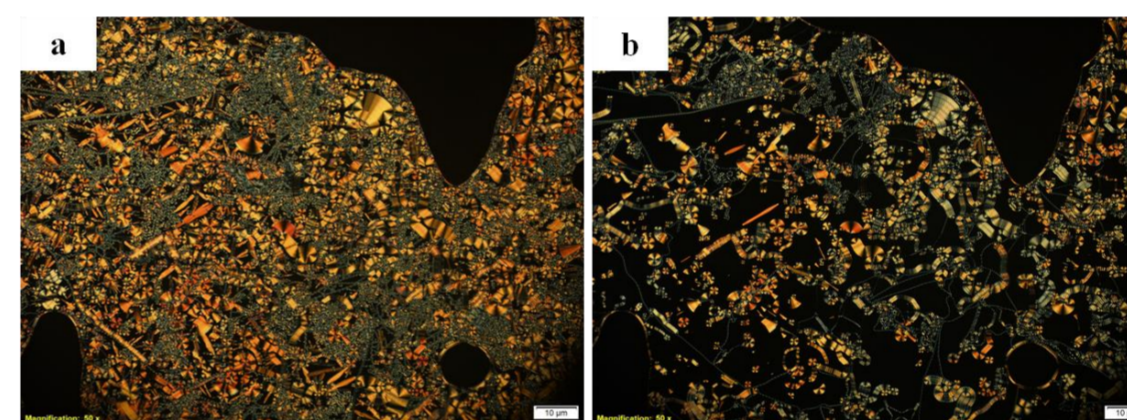
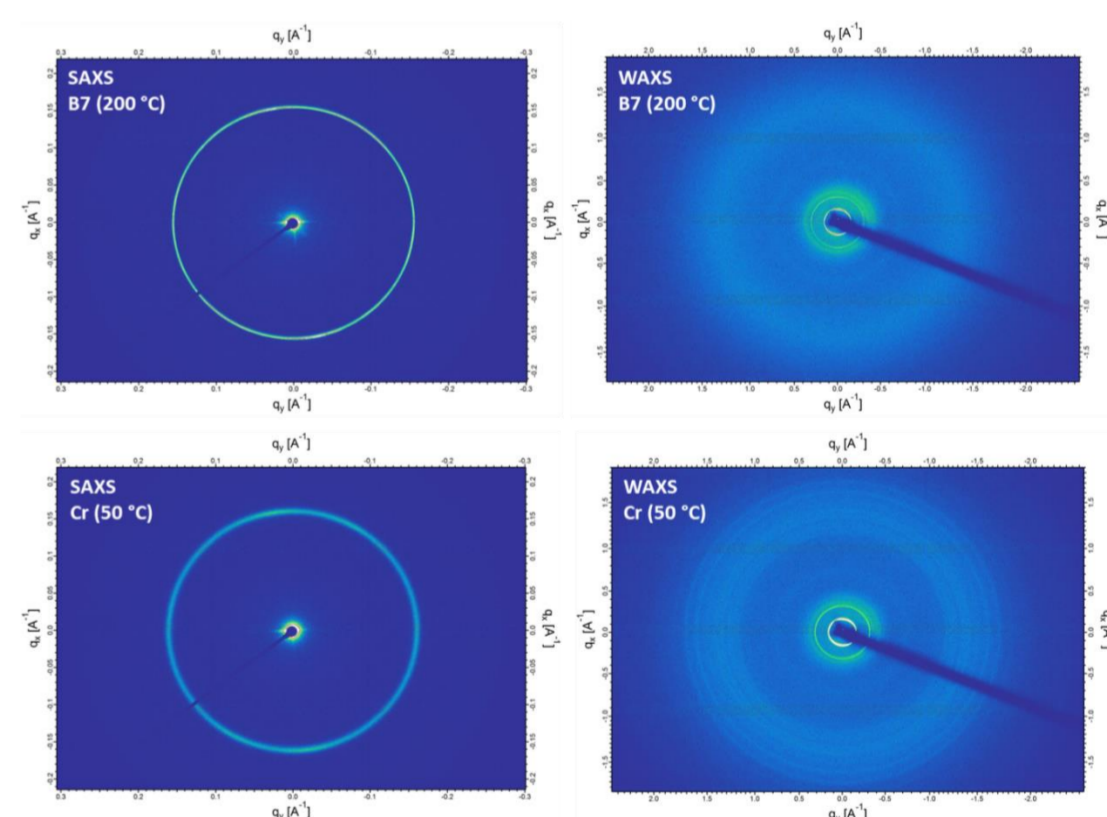


Figura 3. Texturas de MOLP obtidas para o composto **3b** (10°C/mim). Em **a**) mesofase B7 em 200°C e em **b**) logo após o resfriamento do isotrópico em 225°C.

Figura 4. Padrão de SAXS e WAXS realizado para o composto **3b**. SAXS e WAXS mostram apenas um pico para o composto na mesofase, porém, é importante perceber que o pico que aparece na curva de WAXS é bastante alargado, indicando que existe uma desordem das moléculas dentro de uma mesma camada, o que está de acordo com o esperado para uma mesofase do tipo B7 (modulada).



CONCLUSÕES

Três compostos da série sintetizada apresentaram comportamento líquido-cristalino. Os intermediários **1b** e **2b** apresentaram ambos mesofase do tipo SmA. O composto **1b** apresentou ainda mesofase CrE a temperatura ambiente, característica bastante interessante do ponto de vista de aplicação desses compostos. A imina **3b** apresentou arranjo do tipo B7 antiferroelétrico, caracterizado através de voltagem triangular. Observou-se uma forte dependência da presença do anel isoxazol na indução de mesofases, o que pode estar relacionado com a planaridade do anel, que facilita o empacotamento de tais estruturas na faixa de temperatura de mesofase desses compostos.

Agradecimentos

