



**Universidade:
presente!**

**UFRGS
PROPEAQ**



XXXI SIC

21. 25. OUTUBRO. CAMPUS DO VALE

Síntese de cristal líquido 3,5-diarilisoxazóis com grupos polares terminais

Gabriel Müller dos Santos*, Aloir Antonio Merlo

Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

*gmsufrgs@gmail.com

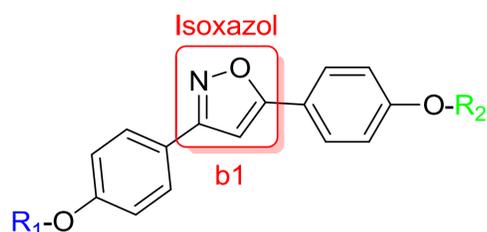
INTRODUÇÃO

A preparação e estudo de novos materiais funcionais é uma área de grande apelo científico e tecnológico. Esses materiais são formados de moléculas orgânicas que respondem a estímulos externos exercendo uma função. Nesse aspecto, qualquer matéria capaz de produzir uma função quando induzido por um agente externo é um material funcional. CL, sensores de luz pH, géis entre outros são exemplos de materiais funcionais de amplo aspecto aplicativo.

O interesse no uso de compostos heterocíclicos como o isoxazol, é em virtude da presença de heteroátomos que agregam propriedades diferenciadas de polaridade e empacotamento, além de sua capacidade em promover mesofases líquido-cristalinas. 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 o deslocamento do heterociclo isoxazol com comportamento líquido-cristalino, foram sintetizadas quatro diferentes moléculas (**a1**, **a2**, **a3** e **a4**). A rota sintética contou com reação de substituição. A partir do núcleo isoxazol (**b1**) e o substrato, foi preparado através da reação de substituição. Os compostos (**a1**, **a2**, **a3** e **a4**), foram purificados, recristalizados e analisados por Infravermelho, RMN de ^1H e ^{13}C , bem como por MOLP, DSC e Raio-X.



a1 R1= C₈H₁₇ R2= C₄H₈Br

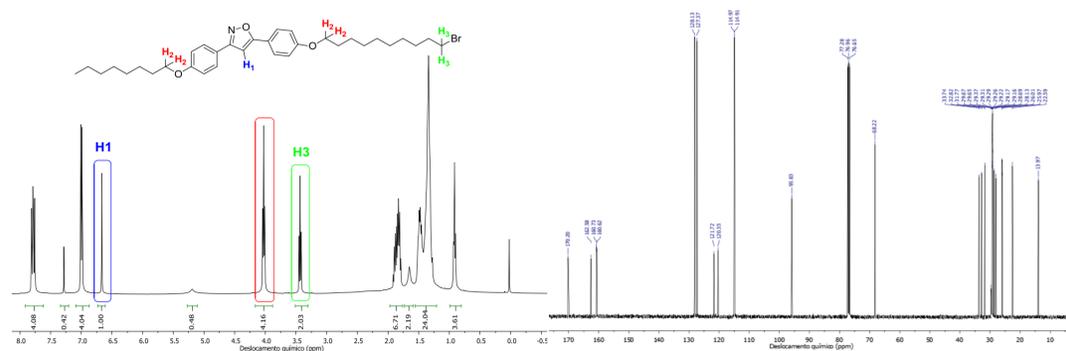
a3 R1= C₁₀H₂₁ R2= C₈H₁₆Br

a2 R1= C₁₂H₂₅ R2= C₆H₁₂Br

a4 R1= C₈H₁₇ R2= C₁₀H₂₀Br

RESULTADOS

A partir das texturas obtidas por MOLP foi possível perceber que as moléculas **a1**, **a3** e **a4** apresentaram comportamento líquido-cristalino. A molécula **a1** apresentou Mesofase SmA em 97°C até 154°C (Figura 1). Para o composto **a4** observou-se uma transição do tipo Cr → SmB em 89°C (Figura 2) e transição SmB → SmA em 140°C



Espectro de RMN ^1H (CDCl₃, 400MHz) da molécula sintetizada **a4**

Espectro de RMN ^{13}C (CDCl₃, 100 MHz) da molécula sintetizada **a4**, apresentando 33 picos representando cada átomo de carbono.

Ambas análises acima de RMN ^1H e ^{13}C , respectivamente, comprovam a formação do composto **a4**, produto da reação de substituição.

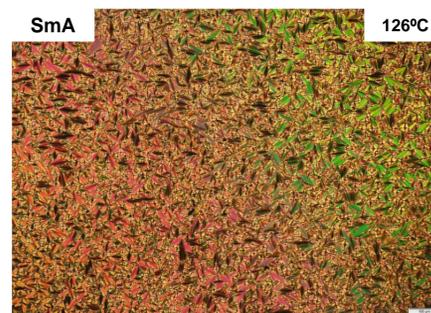


Figura 1. Padrão fan-focal cônico observado para o composto **a1**, MOLP mostram a mesofase SmA entre 97°C e 154°C, e acima de 171,4°C aparece a fase Isotrópica. As faixas de cores que se alteram conforme a temperatura aumenta indicam que existe uma desordem das moléculas dentro de uma mesma camada, o que está de acordo com o esperado para uma mesofase do tipo SmA.

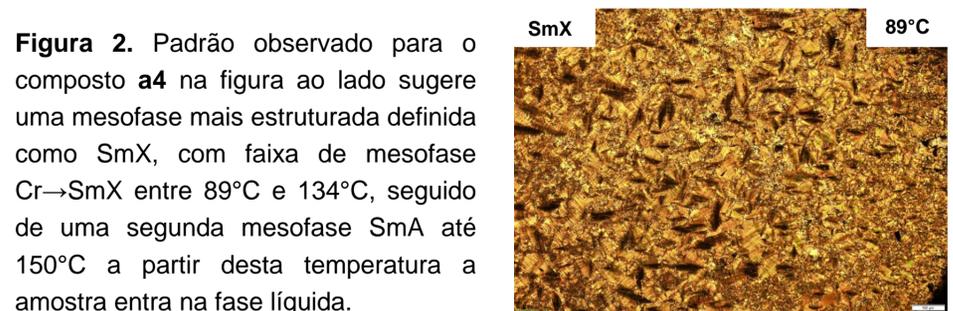


Figura 2. Padrão observado para o composto **a4** na figura ao lado sugere uma mesofase mais estruturada definida como SmX, com faixa de mesofase Cr → SmX entre 89°C e 134°C, seguido de uma segunda mesofase SmA até 150°C a partir desta temperatura a amostra entra na fase líquida.

CONCLUSÕES

Os compostos da série sintetizada apresentaram comportamento líquido-cristalino observado através de MOLP. Os compostos também serão analisados por DSC e por Raio-X para confirmação das Mesofases e dados térmicos. O composto **a1** e **a4** apresentaram temperaturas de clareamento em 172°C e 150°C, respectivamente. Os demais estão sob análise. 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 e da natureza do grupo polar na extremidade da cadeia alquílica.

Agradecimentos:

