

# Síntese e caracterização de materiais colunares automontados por ligações de Hidrogênio derivados do centro 1,3,5-triazina

Juliana M. Poletti (IC)\*, Marília G. B. Cabral (PG) e Rodrigo Cristiano (PQ)

\* [julianampoletti@hotmail.com](mailto:julianampoletti@hotmail.com)

Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba – UFPB, Campus I, 58051-900, João Pessoa-PB

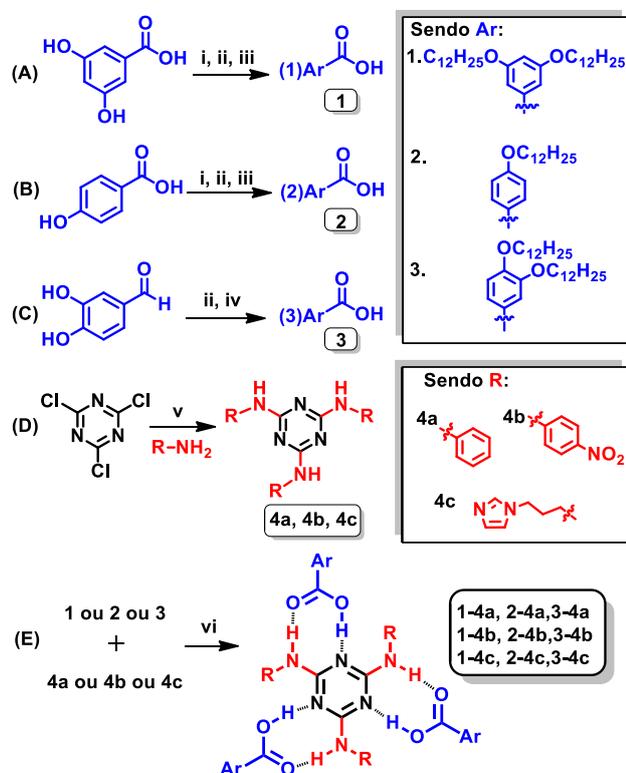
Palavras Chave: Cristais Líquidos, Ligação de Hidrogênio, automontagem, triazina

## Introdução

Sistemas automontados por ligação de hidrogênio (LH) podem gerar dispositivos com reversibilidade de propriedades como transporte de carga.<sup>1,2</sup> Neste trabalho, moléculas finais foram projetadas contendo o centro 1,3,5-triazina, o qual possui uma geometria adequada para o *design* de moléculas discóticas<sup>3</sup>, e com sítios receptores e doadores de LH, capazes de gerar fases líquido cristalinas colunares através de LH com ácidos alcoxibenzóicos com longas cadeias alquílicas em diferentes posições. A síntese e caracterização química e térmica destes materiais é apresentada neste trabalho.

## Resultados e Discussão

A rota sintética para obtenção dos compostos discóticos se encontra no **Esquema 1**.



i.  $CH_3OH$ ,  $H_2SO_4$ , refluxo; ii.  $C_{12}H_{25}Br$ ,  $K_2CO_3$ , 2-butanona; iii. a)  $NaOH$ ,  $MeOH$ , refluxo; b)  $HCl$ ; iv.  $KMnO_4$ ,  $AcONa$ ; v.  $K_2CO_3$ , 1,4-dioxano (demais condições, tabela 1); vi. THF.

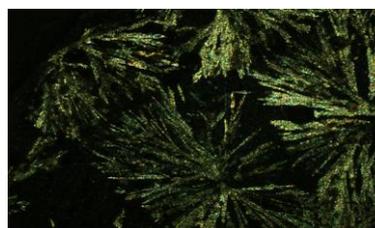
**Esquema 1.** Rota sintética para as moléculas-alvo.

Em especial, para o composto intermediário **4c** foram avaliadas duas rotas sintéticas (**Tabela 1**) buscando bons rendimentos. Contudo, apenas 40% do trîmero foi isolado usando  $EtN_3$  como base.

**Tabela 1:** Condições de síntese para o **4a**.

| Rota | Solvente | Base      | Tempo (refluxo) | Rend. |
|------|----------|-----------|-----------------|-------|
| 1    | MeOH     | $K_2CO_3$ | 56h             | 25%   |
| 2    | MeOH     | $EtN_3$   | 56h             | 40%   |

A eficiência da complexação foi avaliada por IV. Foram observados deslocamentos referentes aos estiramentos do grupo  $C=O$  (ácido carboxílico) para maiores comprimentos de onda e do grupo  $C=N$  (centro triazínico) para menores. Análises preliminares de MQLP confirmaram propriedades líquido-cristalinas. As moléculas **1-4a**, **2-4a** e **3-4a** mostraram um crescimento dendrítico no resfriamento, o que pode indicar fases colunares hexagonais ( $Col_H$ ) (**Figura 1**). DSC e Raio-X ainda serão necessárias para confirmação e completa caracterização das mesofases.



**Figura 1:** Fotomicrografia obtidas por MQLP (33x) durante resfriamento do composto **1-4b** ( $T = 175^\circ C$ ).

## Conclusões

Novos materiais colunares automontados por LH foram sintetizados e caracterizados. Análises preliminares do comportamento térmico indicam formação de fase  $Col_H$ . Quanto às moléculas-alvo contendo o heterociclo imidazol, pretende-se explorar o próprio nitrogênio básico do imidazol como receptor de LH e também como sítio iônico.

## Agradecimentos

UFPB, CNPq e CAPES.

<sup>1</sup> Prabu, N.; Vijayakumar, V.; Mohan, M. *Journal of Molecular Structure.*, **2011**, 994, 387.

<sup>2</sup> Sakajiri, K.; Hirama, T.; Yasuda, K.; Kutsumizu, S.; Watanabe, J. *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2013**, 86, 940.

<sup>3</sup> Cristiano, R.; Eccher, J.; Bechtold, I. H.; Tironi, C. N. Vieira, A. A.; Molin, F.; Gallardo, H. *Langmuir*, **2012**, 28, 11590.