

Síntese de cristais líquidos em forma de Y derivados da 1,3,5-triazina

Eduard Westphal (IC), Rodrigo Cristiano (PG) e Hugo Gallardo (PQ)* hugo@qmc.ufsc.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, 88040-900 Florianópolis, SC.

Palavras Chave: cristais líquidos, triazina, cloreto cianúrico.

Introdução

Na última década resurgiu o interesse no planejamento molecular, síntese e caracterização de novas classes de cristais líquidos (CLs), na qual a forma geométrica é distorcida dos bastões clássicos ou discos. Tais materiais são denominados CLs não-convencionais.¹ Inspirados no trabalho de Sasaki e col.,² os quais utilizaram iminas derivadas do trialdeído **1** com uma estrutura de tripé, na área de reconhecimento molecular, buscamos sintetizar CLs com essa nova geometria que pudesse gerar novas estruturas de fases CL.

Resultados e Discussão

A estrutura molecular dos compostos finais é apresentada na figura 1.

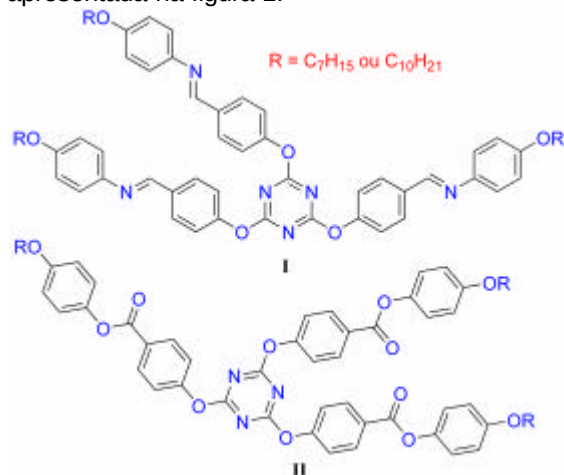
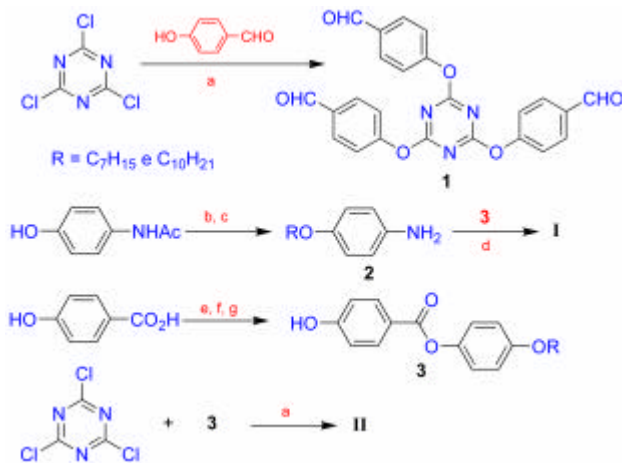


Figura 1. Estrutura das moléculas finais.

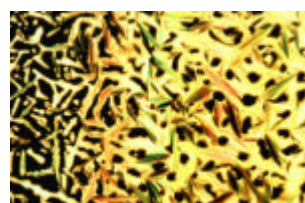
O centro triazínico é diretamente obtido do cloreto cianúrico. Os átomos de cloro podem ser substituídos frente a ataque nucleofílico sobre o carbono do anel. Assim, o trialdeído **1** é obtido pela reação do 4-hidroxibenzaldeído e cloreto cianúrico em uma suspensão de Na_2CO_3 em benzeno (Esquema 1). As moléculas-alvo de estrutura **I** são preparadas pela reação de **1** e 4-alcóxianilina em etanol. Devido à baixa estabilidade do grupo imina frente à hidrólise, moléculas análogas com espaçadores ésteres foram sintetizadas (Estrutura **II**). Para isso, composto **3** foi preparado a partir do ácido *p*-hidroxibenzóico em três etapas: reação com cloroformato de etila, esterificação com *p*-alcoxifenol seguido por O-desproteção usando NH_4OH .



Reagentes: a) Na_2CO_3 , benzeno; b) RBr, K_2CO_3 , butanona; c) i. HCl , H_2O , ii. OH^- ; d) EtOH ; e) ClCO_2Et , $\text{NaOH}/\text{H}_2\text{O}$; f) i. SOCl_2 , ii. *p*-alcoxifenol, TEA, CH_2Cl_2 ; g) NH_4OH , isopropanol.

Esquema 1. Rota sintética para moléculas-alvo.

A análise das propriedades térmicas foi realizada por MOLP (microscopia óptica de luz polarizada) e DSC. Todos os compostos exibiram fase líquido cristalina esmética A (SmA) numa faixa de 54°C em média, com textura focal cônica (Figura 2).



Comp.	C_nH_{2n+1}	n	Transições (°C)
I	7	Cr	170 → 219
			169 → 217
I	10	Cr	159 → 214
			147 → 212
II	7	Cr	153 → 210
			120 → 207

Figura 2. Fase SmA exibida por **I** (n=10) a 209 °C; e transições. Cr=cristal, SmA=esmética A, l=líquido.

Uma estrutura tripé teria um mesomorfismo colunar. A fase observada é, no entanto, SmA típica de estrutura calamítica. Isso evidencia uma conformação molecular na forma de bastão, só possível em uma geometria em Y como na Figura 1.

Conclusões

Novos CLs com geometria em Y contendo 1,3,5-triazina foram sintetizados e caracterizados. **I** e **II** apresentaram fase SmA preferencialmente.

Agradecimentos

UFSC, CNPq, MERCK, FAPESC

¹ Goodby, J.W.; Bruce, D.W.; Hird, M.; Imrie, C. e Neal M. J. *Mater. Chem.* **2001**, 11, 2631.

² Tahmassebi, D.C. e Sasaki, T. *J. Org. Chem.* **1994**, 59, 679.