

Síntese e caracterização de novos cristais líquidos contendo o heterociclo isoxazol 3,5-dissubstituídos

Fernando Bryk (PG), Gilmar Conte (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, isoxazol, cicloadição 1,3-dipolar.

Introdução

Cristais líquidos têm se tornado a quintessência dos materiais eletrônicos orgânicos da nossa era, estimulado pelo crescente avanço tecnológico dos *displays*, envolvendo diferentes classes de novos materiais, que englobam desde sistemas de baixa massa molar a poliméricos quirais ou aquirais, com propriedades foto e eletroativas para seu uso também em dispositivos eletroluminescentes^{1, 2}. O objetivo geral deste trabalho é contribuir para a compreensão do fenômeno do mesomorfismo estudando as relações entre a estrutura molecular e o comportamento mesomórfico. Descreve-se a síntese de novos cristais líquido contendo o heterociclo isoxazol 3,5-dissubstituído, mediante a reação de cicloadição 1,3-dipolar, catalisada por Cu(I), entre um acetileno terminal e cloreto de carboximidoila.

Resultados e Discussão

As moléculas alvo são mostradas na Figura 1:

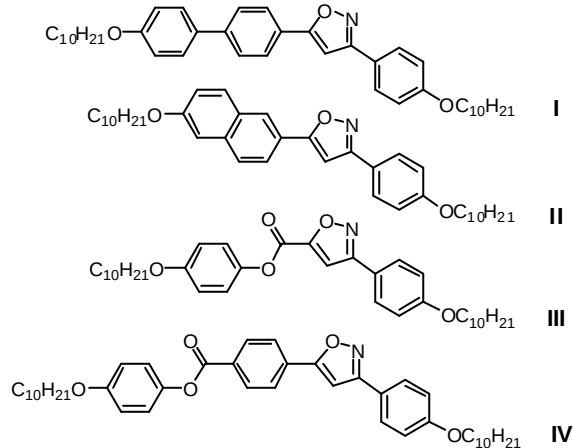
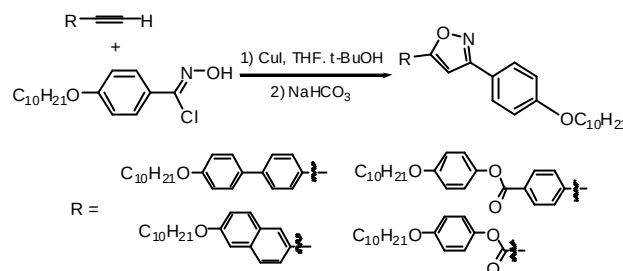


Figura 1. Estrutura das moléculas alvo.

Os derivados acetilênicos terminais necessários para a síntese destes compostos foram obtidos mediante reação de acoplamento G-C (acoplamento de Sonogashira), a partir dos brometos correspondentes e 2-metil-3-buten-2-ol, usando o protocolo descrito por Gallardo *et al.*³. O acetileno terminal usado para a obtenção de **III** foi preparado pela reação de esterificação, entre *p*-decilóxi-fenol e ácido propiônico, e posteriormente hidrolisado em KOH. O cloreto de arilcarboximidoila foi obtido a partir do *p*-hidróxibenzaldeído, seguido de uma reação de alquilação, oximação com cloridrato de hidroxilamina, e finalmente tratado com *N*-clorosuccinimida 30ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

em DMF, fornecendo o produto desejado em 90%. As reações de ciclo adição entre os acetileno terminais e o cloreto de carboximidoila foram realizadas na presença de CuI/NaHCO₃/THF/*t*-BuOH e a t.a. gerando os compostos alvos I,II,III e IV, esquema 1.



Esquema 1. Rota sintética para moléculas-alvo.

Os dados de rendimento e as mesofases observadas estão apresentados na Tabela 1

Tabela 1: Mesofases observadas e rendimentos dos compostos alvo

Composto	Mesofase ^a	Rendimento(%)
I	SmA	40
II	SmA	43
III	SmC e N	40
IV	SmA	32

^a - SmA Esmética A; SmC: Esmética C; N: Nemática.

Todos os compostos intermediários e finais foram caracterizados por espectroscopia de infravermelho e RMN de ¹H e ¹³C, além das análises elementares. As propriedades mesomórficas foram observadas por microscopia óptica de luz polarizada, indicando uma forte tendência esmetogénica com faixa de temperatura de > 90°C.

Conclusões

Quatro novas moléculas líquido-cristalinas derivadas do isoxazol foram sintetizadas, usando a reação de cicloadição 1,3-dipolar.

Agradecimentos

UFSC, CNPq, FAPESC

¹Adam, D.; Schuhmacher, P.; Simmerer, J.; Haussling, L.; Siemensmeyer, K.; Etzbach, K. H.; Ringsdorf, H.; Haarer, D. *Nature*, 371,141 – 143, **1994**. ²Contoret, A. E. A.; Farrar, S. R.; O'Neill, M.; Nicholls, J. E. *Chem. Mater.*,14, 1477 – 1487, **2002**. ³Conte, G.; Cristiano, R.; Ely, F.; Gallardo, H. *Synth. Comm.* **2006**, 36, 951-958.