

Síntese, caracterização e comparação de novos cristais líquidos discóticos funcionalizados contendo os grupos azo e azoxi.

Eduard Westphal (PG), Anna Paula Carminatti Martins (IC), Hugo Gallardo (PQ)* hugo@qmc.ufsc.br

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

Palavras Chave: Cristal líquido, Optical Switch, Azo, Azoxi.

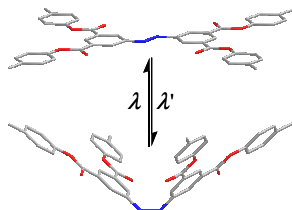
Introdução

Cristais líquidos são compostos que possuem a auto-organização do estado sólido aliada a fluidez do estado líquido. Devido a vasta gama de propriedades ópticas, elétricas e/ou magnéticas desta classe de material, possuem aplicações práticas que vão desde displays, dispositivos de armazenamento de dados ópticos, fotocondutores, OLEDs e até sabões, detergentes, polímeros, músculos e peles artificiais^{1,2}

Azo compostos também têm recebido crescente atenção devido a atraente característica de foto-isomerização reversível cis-trans do grupamento azo, alterando significativamente a geometria molecular quando sujeitadas a luz visível.³

Com o intuito de unir essas características em um único material, sintetizamos novos cristais líquidos discóticos contendo o grupo azo e o grupo azoxi. Como demonstrado na figura 1, o material deverá apresentar propriedades de um *optical switch*, funcionando ora como um material anisotrópico (*trans*) ora como um material isotrópico (*cis*), permitindo um excelente controle sobre suas propriedades.

Figura 1. Alteração na estrutura molecular pela foto-



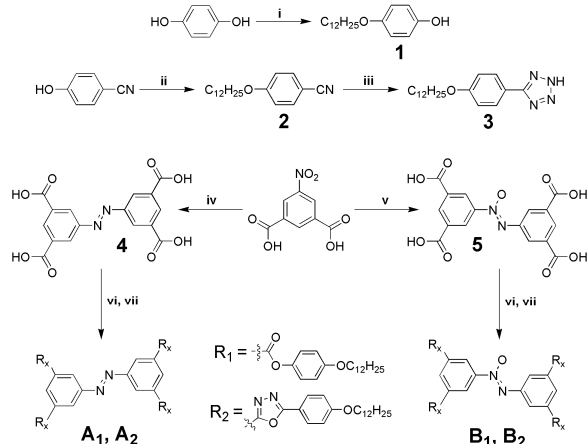
isomerização reversível sob luz visível.

Resultados e Discussão

A síntese dos produtos finais deu-se pela produção inicial dos substituintes **1** e **3**, através de alquilações e no caso do substituinte **3**, formação do anel tetrazol. As unidades centrais tetra-ácidas contendo os grupos azo (**4**) e azoxi (**5**) são sintetizadas de maneira semelhantes, variando apenas nas concentrações de base e dextrose (2,25 e 0,75 eq. respectivamente) utilizadas. Por fim, Os grupos ácidos são convertidos em seus respectivos cloretos e reagidos com 4,2 equivalentes do composto **1** para formar os produtos finais A1 e B1, ou ainda com 4,2 equivalentes do composto **3** para

formar A2 e B2. No geral, os rendimentos obtidos foram bons, variando entre 47 e 93 %.

Condições: i) brometo de dodecila, NaOH, MeOH, H₂O; ii)



brometo de dodecila, K₂CO₃, butanona; iii) NaN₃, NH₄Cl, DMF; iv) dextrose (2,25 eq.), NaOH, H₂O; v) dextrose (0,75 eq.), NaOH, H₂O; vi) SOCl₂, DMF_{cat.}; vii) **1** ou **3**, piridina seca, DMAP_{cat.}.

Esquema 1. Rota sintética das moléculas alvo.

O composto B1 apresenta ótima estabilidade térmica (T_{dec.} = 330 °C) além de apresentar mesofase hexagonal colunar (114-156 °C no aquecimento) e foto-isomerização cis-trans. Análises preliminares de MOLP confirmam que os compostos A1, A2 e B2 também apresentam características líquido-cristalinas e foto-isomerização, porém estudos mais acurados deverão ser realizados (DSC, TGA e absorção no UV-vis).

Conclusões

Novos cristais líquidos discóticos contendo os grupos azo e azoxi foram sintetizados. Análises preliminares de MOLP confirmam as propriedades líquido-cristalinas. A foto-isomerização ainda será estudada mais aprofundadamente.

Agradecimentos

UFSC e CNPq.

¹ Vieira, A. A.; Cristiano, R.; Bortoluzzi, A. J.; Gallardo, H. *J. Mol. Struct.* **2007** (in press).

² Cristiano, R.; Santos, D.M.P.O.; Gallardo, H. *Liquid Crystal* **2005**, 32, 7.

³ Wang, S.; Wang, X.; Li, L.; Advincula, R. C. *J. Org. Chem.* **2004**, 69, 9073.