

Síntese de novos cristais líquidos discóticos contendo o heterociclo 1,3,4-oxadiazol

Eduard Westphal (PG), Estela Muchiuti Aranha (IC), Hugo Gallardo (PQ)* hugo@gmc.ufsc.br

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

Palavras Chave: Cristal Líquido Discótico, 1,3,4-oxadiazol, Luminescência.

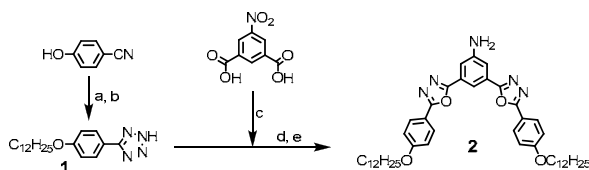
Introdução

A busca de novos materiais com propriedades interessantes e alta aplicação industrial é um grande desafio científico e tem levado a fusão de diferentes propriedades em um único material.^{1,2,3,4} Neste contexto, cristais líquidos funcionalizados têm encontrado uma enorme aplicação nos mais diversos dispositivos como por exemplo: displays, termômetros, células fotovoltaicas, semicondutores orgânicos e dispositivos ópticos de armazenamento de dados. Com intuito de desenvolver novos materiais com alta aplicabilidade, nós utilizamos o heterociclo 1,3,4-oxadiazol, o qual é bem conhecido pela sua luminescência azul, estabilidade térmica e também pela capacidade de transporte de elétrons, já sendo largamente empregado em muitas moléculas líquido-cristalinas e OLEDs.⁵

No presente trabalho, descrevemos a síntese, caracterização e algumas propriedades de três novas moléculas discóticas contendo o heterociclo 1,3,4-oxadiazol.

Resultados e Discussão

A síntese das moléculas discóticas foram realizadas em duas etapas. Na primeira foi preparado o intermediário chave **2**, conforme apresentado na figura 1.



Condições: a) $\text{BrC}_{12}\text{H}_{25}$, K_2CO_3 , butanona (82,1%); b) NaN_3 , NH_4Cl , DMF (67,9%); c) SOCl_2 , DMF_{cat.}; d) piridina seca, tetrazol (**1**) (74,4%); e) Pd/C(10%), THF (82,0%).

Figura 1. Síntese do intermediário **2**.

Posteriormente, a amina **2** foi reagida com o ácido 3,4,5-tridodeciloibenzóico, o ácido trans-1,4-ciclohexanodicarboxílico e o anidrido 1,2,4,5-benzenotetracarboxílico, formando os produtos **3**, **4** e **5** respectivamente (figura 2).

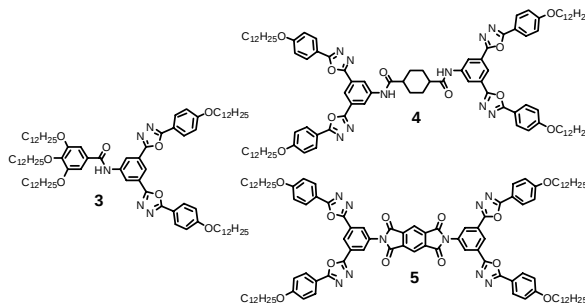


Figura 2. Produtos-finais sintetizados (**3**, **4** e **5**).

Todos os produtos foram caracterizados por RMN- ^1H , ^{13}C e IV. Análises prévias em Microscópio Óptico equipado com Luz Plano-Polarizada mostram que apenas os compostos **3** e **5** apresentam comportamento líquido-cristalino. O comportamento térmico dos compostos já foi determinado por DSC e TGA. Além disso, o produto **3** teve sua mesofase caracterizada por XRD em baixo ângulo. Esta análise também será realizada para o produto **5**.

Os compostos apresentam fluorescência na região do azul, conforme já esperado para compostos contendo o heterociclo 1,3,4-oxadiazol.

Conclusões

Novos cristais líquidos discóticos foram sintetizados com bons rendimentos e completamente caracterizados. Suas propriedades térmicas e ópticas foram estudadas, porém análises mais aprofundadas ainda deverão ser realizadas.

Agradecimentos

UFSC, CNPq, FAPESC, PRONEX, INCTcat.

¹ Cristiano, R.; Westphal, E.; Bechtold, I.; Adailton, J.B.; Gallardo, H. *Tetrahedron*, **2007**, 63, 2851;

² Laschat, S.; Giesselmann, F. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, 46, 4832;

³ Sergeyev, S.; Pisula, W.; Geerts, Y. H. *Chem. Soc. Rev.*, **2007**, 36, 1902;

⁴ Cristiano, R.; Gallardo, H.; Adailton, J.B.; Bechtold, I.; Campos, C.E.M.; Longo, R.L. *Chem. Comm.* **2008**, 5134;

⁵ Cristiano, R.; Santos, D.M.P.O.; Gallardo, H. *Liquid Crystal* **2005**, 32, 7.