

Síntese e caracterização de sistemas auto-organizados colunares baseados no heterociclo 1,3,4-oxadiazol.

André A. Vieira^a (PG), Hugo Gallardo^a (PQ)*, Joaquín Barberá^b(PQ), Pilar Romero^b (PQ), Teresa Sierra^b (PQ), José L. Serrano^b (PQ). e-mail: hugo@gmc.ufsc.br.

^aDepartamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina-UFSC, 88040-900 Florianópolis, SC, Brasil

^bDepartamento de Química Orgânica, Universidade de Zaragoza-UNIZAR, 50009 Zaragoza, Espanha.

Palavras Chave: Cristais líquidos colunares, 1,3,4-oxadiazol, luminescência.

Introdução

A natureza oferece muitos exemplos de sistemas biológicos que apresentam propriedades únicas devido a sua organização supramolecular. A importância desses sistemas é evidente na ordem helicoidal do DNA, no vírus mosaico do tabaco ou na tripla hélice do colágeno. Esses exemplos são fontes de inspiração para o desenvolvimento de materiais moleculares funcionalizados.

Os Cristais líquidos (CL) representam um estado intermediário entre o sólido tridimensionalmente organizado e o líquido isotrópico, esse estado pode ser apresentado por um composto puro ou uma mistura. Serrano e col.^{1,2} descreveram a possibilidade de obter CL colunares a partir de ligações de hidrogênio formadas entre ácidos carboxílicos e aminas, tais estruturas colunares apresentaram ordem helicoidal. Esta organização helicoidal pode ser usada para amplificar as propriedades intrínsecas de materiais.

Neste contexto, esse trabalho apresenta a síntese de ácidos em forma de "V" contendo 1,3,4-oxadiazóis e suas associações com melamina.

Resultados e Discussão

A síntese dos ácidos teve início na preparação do heterociclo 1,3,4-oxadiazol a partir de aril tetrazóis seguindo a rota de Huisgen. Os tetrazóis com cadeias alcoxi de 10, 12 e 14 carbonos foram reagidos com cloreto de 4-(metoxicarbonil)benzoíla em presença de piridina para obter os intermediários **4**. Na sequência, os ésteres **4** foram hidrolisados com KOH em EtOH/H₂O para obter seu respectivos ácidos **3** conforme a Figura 1.

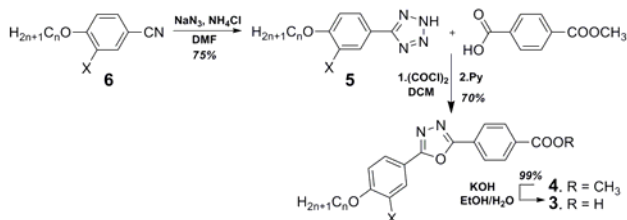


Figura 1. Preparação dos ácidos intermediários **3**.

Os ácidos **3** foram usados para a dupla esterificação do triisopropilsilil 3,5-dihidroxibenzoato com DPTS/DCC. Os compostos finais **m1** foram obtidos posteriormente a desproteção do grupo triisopropilsilil com TBAF a -78°C em diclorometano.

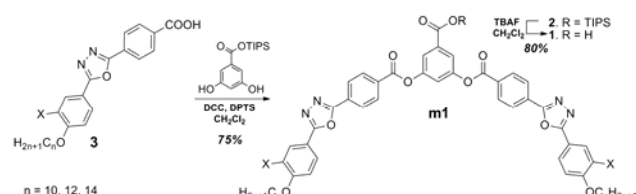


Figura 2. Síntese dos ácidos finais **1** forma de "V".

Todos os ácidos **m1** foram caracterizados por espectrometria de IV, massas, CHN, RMN de ¹H e ¹³C. Após caracterização dos ácidos finais foram preparadas mesclas usando ácidos **m1** e melamina na razão 3:1, respectivamente. As mesclas obtidas foram analisadas por DSC, microscopia óptica de luz polarizada e difração de raio-X. Os dados obtidos revelam a formação de complexos auto-organizados típicos de CL colunares. Essas estruturas são formadas após a fusão da mescla e lento resfriamento, a organização do material é mantida até a temperatura ambiente.

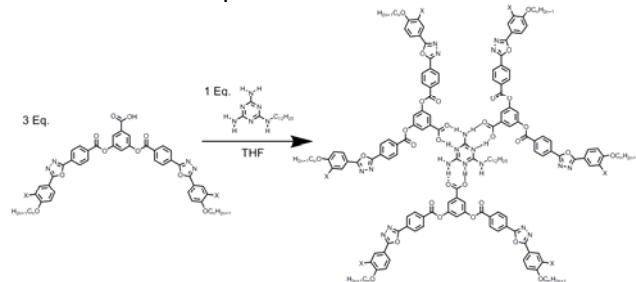


Figura 3. Preparação dos complexos auto-organizados.

Conclusões

Os ácidos finais **m1** derivados do heterociclo 1,3,4-oxadiazol foram sintetizados, caracterizados e mesclados com melamina. As análises dos materiais revelaram a formação de complexos CL colunares por ligações de hidrogênio.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, UFSC

¹ Vera, F.; Serrano, J. L. *Angew. Chem.* **2007**, 46, 1873.

² Puig, L.; Serrano, J. L. *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, 128, 4487.