

# Síntese de um Material Iônico com Automontagem Colunar derivado da 3,4,5-trialcóxibenzilamina, uma amidina alifática e CO<sub>2</sub>

Rodrigo Cristiano<sup>1</sup> (PQ)\*, Tao Yu<sup>2</sup> (PG) e Richard G. Weiss<sup>2</sup> (PQ)\* [rodrigoqmc@gmail.com](mailto:rodrigoqmc@gmail.com)

<sup>1</sup> Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba – UFPB, João Pessoa-PB; <sup>2</sup> Department of Chemistry, Georgetown University, Washington DC.

Palavras Chave: líquido iônico, dióxido de carbono, galato de metila.

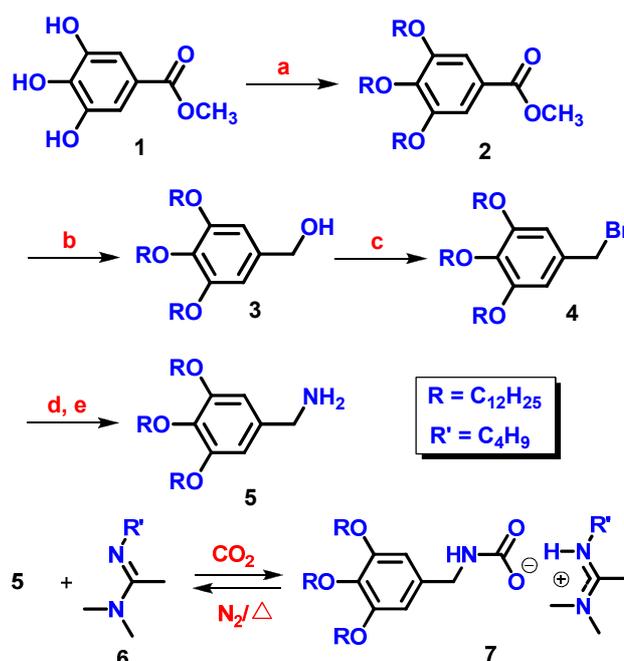
## Introdução

A química de moléculas simples, tais como CO<sub>2</sub>, pode ser explorada na síntese de moléculas complexas e de grande valor agregado.<sup>1</sup> Exemplos recentes da literatura envolvem a preparação de líquidos iônicos à temperatura ambiente, compostos de carbamato de amidínio através do borbulhamento de CO<sub>2</sub> em uma mistura 1:1 de uma amidina e uma amina primária.<sup>2</sup> Os líquidos iônicos gerados possuem a propriedade de reversibilidade: podem ser reconvertidos aos seus estados líquidos não-iônicos originais, simplesmente por borbulhar através desses um gás deslocador tal como o N<sub>2</sub>. Aliando-se a propriedade de reversibilidade de líquido iônico com a automontagem e auto-organização, intrínsecas de um cristal líquido discótico, pode-se gerar interessantes canais unidimensionais condutores de íons, com uma chave liga-desliga entre fase condutora e não condutora. Como parte inicial desse projeto, esse trabalho apresenta a síntese e caracterização de uma benzilamina derivada do galato de metila. Testes de geração de fase iônica com uma amidina alifática e CO<sub>2</sub> foram investigados bem como as propriedades térmicas do material obtido.

## Resultados e Discussão

A síntese da 3,4,5-trisdodeciloxybenzilamina (**5**) foi realizada em 4 etapas, de acordo com esquema 1. Composto **5** não é cristal líquido, cristalização a partir do líquido isotrópico ocorre a 49°C, embora possua uma interessante textura esferulítica quando observada por microscopia óptica de luz polarizada (MOLP). Isso é evidência para algum empacotamento colunar dessas moléculas no estado sólido. Carbamato de amidínio **7** foi preparado a partir do borbulhamento de CO<sub>2</sub> sob uma mistura homogênea de **5** e amidina **6** à temperatura ambiente. Análises de RMN de <sup>1</sup>H mostraram apenas 40% de conversão para a forma iônica (**7**) quando sem a presença de solvente. Em solução de CHCl<sub>3</sub> no entanto, a conversão para forma iônica foi quantitativa. As propriedades térmicas desse material foram avaliadas por TGA, DSC e MOLP. Apresenta textura esferulítica à temperatura ambiente, embora nenhuma evidência para fase líquido cristalina foi obtida.

33ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química



a. n-C<sub>12</sub>H<sub>25</sub>Br, K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, TBAB, butanona (92%) b. LiAlH<sub>4</sub>, THF (91%) c. PBr<sub>3</sub>, Et<sub>2</sub>O (90%) d. ftalimida de potássio, DMF e. NH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>.H<sub>2</sub>O (19% nas duas etapas)

Esquema 1. Rota de síntese das moléculas-alvo.

Possui transições reversíveis Cr-Cr 8.7°C e Cr-I 33°C. TGA indica o início de perda de CO<sub>2</sub> próximo à temperatura de fusão, gerando novamente a mistura não iônica.

## Conclusões

Um composto iônico reversível com natureza estrutural passível de geração de fase colunar foi preparado e caracterizado. Embora o composto **7** não seja cristal líquido, sua natureza dinâmica e automontagem colunar não devem ainda ser desprezadas. Em um próximo passo, modificações estruturais, simples tais como mudança no comprimento das cadeias alifáticas, serão realizadas buscando-se a fase colunar iônica.

## Agradecimentos

CAPES-Brasil, NSF-EUA, Georgetown University

<sup>1</sup> Yu, T.; Cristiano, R. e Weiss, R. G. *Chem. Soc. Rev.* **2010**, in press.

<sup>2</sup> Yamada, T.; Lukac, P. J.; George, M. e Weiss, R. G. *Chem. Mater.* **2007**, *19*, 967–969.