

Síntese de dímeros e investigação de propriedades líquido-cristalinas.

Rachel F. Magnago* (PQ), Maia L. Xikota (IC) e Daniela M. Souza (IC). Rachel.magnago@unisul.br

UNA Tecnológica, Universidade do Sul de Santa Catarina – UNISUL, Palhoça/SC.

Palavras Chave: Cristal líquido, dímeros.

Introdução

O sol é uma grande fonte de geração de energia, pois é uma fonte de vida e de origem da maioria das outras formas de energia na Terra. A principal vantagem das células solares é, além de utilizarem a energia solar, a sustentabilidade. Captar energia solar para vir a suprir nossas necessidades energéticas é possível desde que conversões químicas apropriadas sejam executadas e os processos devem ser aprimorados através de avanços tecnológicos. A síntese de novas moléculas orgânicas diméricas contribui para o avanço da tecnologia de placas fotovoltaicas que utilizam moléculas orgânicas como matéria prima para a formação das células orgânicas ou também denominadas placas de energia de terceira geração.

Resultados e Discussão

A obtenção de novos cristais líquidos termotrópicos é resultado da seleção correta dos fragmentos que formam a molécula, tais como, grupos rígidos, grupos de ligação, grupo espaçador e funcionalidade terminal. A seleção destes grupos levaram a síntese de dois novos compostos cujas estruturas estão representadas na figura 1.

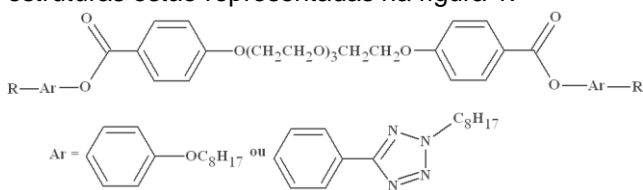


Figura 1. Estrutura dos dímeros finais obtidos.

Para se obter os compostos finais foram realizadas reações clássicas, como alquilação, esterificação, hidrólise e adição 1,3-dipolar do anion azida a nitrila. Devido às metodologias serem consagradas, obteve-se rendimentos de síntese entre 80 e 95 %. Todos os compostos sintetizados foram caracterizados por espectroscopia de IV, RMN ¹H e ¹³C e por Microscopia Ótica de Luz Polarizada, sendo que nenhum composto apresentou mesofase. O composto bis(4-(2-octil-2H-tetrazol-5-il)fenil)-4,4'-(((oxibis(etano-2,1-diil))bis(oxi))bis(etano-2,1-diil))bis(oxi)dibenzoato apresentou ponto de fusão

de 46,5 °C e o composto bis(4-octiloxifenil)- 4,4'-(((oxibis(etano-2,1-diil))bis(oxi))bis(etano-2,1-diil))bis(oxi)dibenzoato apresentou ponto de fusão de 47,9 °C, no processo de aquecimento da amostra durante a realização da Microscopia Ótica de Luz Polarizada.

As estruturas sintetizadas não apresentaram características estruturais adequadas para o surgimento de mesomorfismo, ou seja, as cadeias flexíveis longas e as seções rígidas não forneceram relação desejável para a geração de mesofase. As moléculas apresentam núcleos rígidos, devido à presença de anéis aromáticos (tetrazol e aril) e grupos de ligação (carboxilato e éter). Os grupos de ligação mantiveram a linearidade da molécula e introduziram momento dipolar transversal ao eixo molecular. O anel tetrazol proporciona um aumento na seção rígida da molécula e um desvio da linearidade na molécula provocada pela diss substituição do anel tetrazol, enfraquecendo o empacotamento da rede cristalina, e como conseqüência, não aumentando a temperatura de fusão do composto, mas não o suficiente para surgiu mesomorfismo. As cadeias terminais e o grupo espaçador têm a finalidade de estabilizar a geração de mesofase, o que não foi observado nas moléculas preparadas. Aumentar a seção rígida das moléculas com adição de mais anéis aromáticos, bem como adicionar grupos que apresentem dipolo lateral não perdendo a conjugação entre as unidades pode mostrar-se eficaz para contribuir na polarizabilidade, linearidade e rigidez das moléculas finais e então gerar mesomorfismo em novas moléculas.

Conclusões

O trabalho de síntese das moléculas foi alcançado com rendimentos adequado para o estudo das propriedades mesomórficas e caracterização espectroscópica dos produtos. Os dois compostos finais sintetizados não apresentaram mesofases. Estes estudos contribuem na busca de novos materiais líquidos cristalinos para desenvolver aplicação em placas de energia.

Agradecimentos

UNISUL, CNPq/PIBIC/PIBITI

Magnago, R. F. et al. Arkivoc, v. XVII, p. 157-166, 2009.