

Síntese e Estudo das Propriedades Térmicas e Ópticas de Compostos Orgânicos Iônicos

Danilo Henrique da Silva¹ (PG), Alana Carolina Windisch¹ (IC), Eduard Westphal¹ (PG), Juliana Eccher² (PG), Ivan H. Bechtold² (PQ), Hugo Gallardo¹ (PQ)*

¹ Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), 88040-900 Florianópolis, SC, Brasil.

² Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), 88040-900 Florianópolis, SC, Brasil.

* Endereço de correspondência: Tel.: +55 48-3721-9544; e-mail: hugo@qmc.ufsc.br

Cristais Líquidos Iônicos, 1,3,4-oxadiazol, luminescência

Introdução

Os Cristais Líquidos (CLs), um estado intermediário aos estados sólido e líquido, apresentam um nível organizacional incomum a materiais com fluidez e, por isso, o crescente interesse em suas propriedades diferenciadas.¹⁻³ Os Cristais Líquidos Iônicos são um campo promissor e ainda carente em estudos, apresentando em adicional as propriedades de Líquido Iônico. Este trabalho descreve a síntese de sete moléculas orgânicas iônicas cujas estruturas foram planejadas almejando-se a obtenção de características líquido-cristalinas. Foram também investigadas as propriedades térmicas e ópticas dos materiais obtidos através de MOLP, DSC, TGA, XRD, absorção no UV-vis e emissão fluorescente.

Resultados e Discussão

Os sete compostos iônicos orgânicos são exibidos na figura 1. As estruturas foram planejadas para conter um centro rígido com tripla ligação carbono-carbono ou o grupo fluoróforo 1,3,4-oxadiazol, variando o número de cadeias alifáticas, seu tamanho e também os contra-íons.

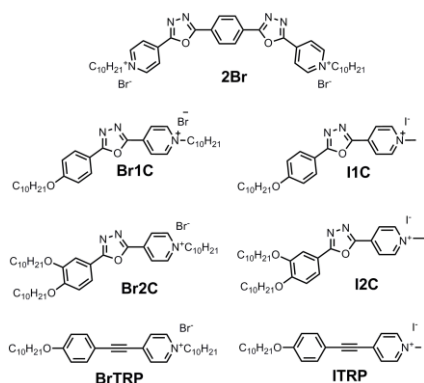


Figura 1. Compostos orgânicos sintetizados.

Na síntese dos compostos, foram utilizadas reações de alquilação de grupos fenólicos e piridínicos, formação dos heterociclos tetrazol e 1,3,4-oxadiazol⁴ e acoplamento cruzado do tipo Sonogashira.

A tabela 1 indica a estabilidade térmica dos compostos sintetizados bem como suas respectivas mesofases.

Tabela 1 - Dados das transições de fase e estabilidade térmica para os compostos finais.

Compostos	Transições	T °C	T _{dec.} °C
2Br	-	-	302
Br1C	Cr-SmA SmA-Dec.	178,0 221,0	221
I1C	Cr-SmA SmA-I	206,0 220,0	227
Br2C	Cr-SmA SmA-I	150,0 190,3	212
I2C	Cr-Col Col-Dec	188,0 199,0	199
BrTRP	Cr-SmA SmA-I	179,0 197,0	223
ITRP	Cr-SmA SmA-I	134,0 210,0	237***

Cr – Cristalina; SmA – Esmética A; Col – Colunar; I – Isotrópico; *Transições determinadas por MOLP usando taxas de aquecimento de 10 °C min⁻¹ durante o primeiro aquecimento; **Valor determinado por TGA em atmosfera de N₂ com taxa de aquecimento de 10 °C min⁻¹; ***Determinado por MOLP.

O composto **Br1C** foi escolhido para análise em XRD (Difratometria de Raio-X), a qual indicou uma espessura de camada de 32,13 Å, evidenciando um fenômeno de interdigitação.

Os compostos apresentaram absorção no UV-Vis entre 250 e 370 nm sendo que somente os compostos **2Br**, **Br1C** e **I1C** apresentaram emissão máxima em 441, 553 e 555 nm respectivamente, evidenciando a não influência do contra-íon.

Conclusões

Sete novas moléculas orgânicas foram sintetizadas com sucesso, sendo que seis apresentaram comportamento líquido-cristalino. O tamanho e o número das cadeias mostrou ser crucial no comportamento térmico e óptico dos materiais, e o contra-íon não mostrou influência significativa.

Agradecimentos

CNPq, FAPESC, INCT-Cat e UFSC

¹ Binnemans, K. *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 4148.

² Westphal, E.; Bechtold, I.H.; Gallardo, H. *Macromolecules* **2010**, *43*, 1319-1328.

³ Lava, K.; Binnemans, K.; Cardinaels, T. *J. Phys. Chem. B* **2009**, *113*, 9506.

⁴ Cristiano, R.; Ely, F.; Gallardo, H. *Liq. Cryst.* **2005**, *32(1)*, 15.