

Cristais líquidos derivados de 1,2,4-oxadiazol exibindo alinhamento homeotrópico espontâneo

Marília Gabriela Belarmino Cabral (PG)* e Rodrigo Cristiano (PQ). mariliagabriela.qi@gmail.com

Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba – UFPB, Campus I, 58051-900, João Pessoa-PB

Palavras Chave: cristais líquidos, 1,2,4-oxadiazol, automontagem

Introdução

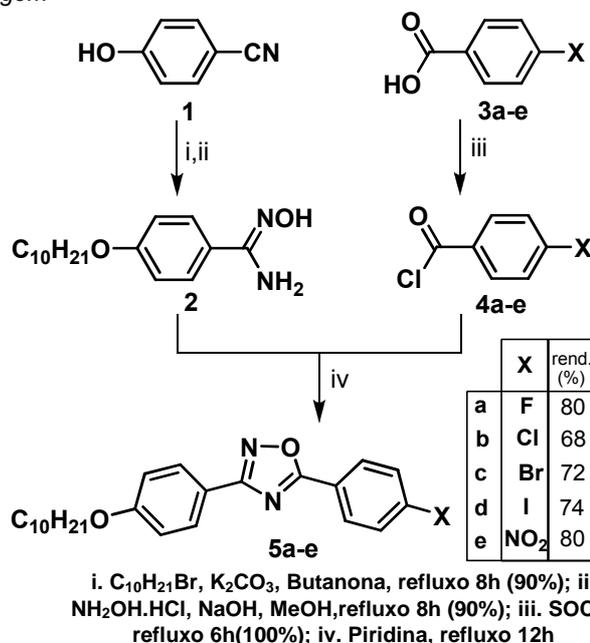
O potencial de se explorar o padrão de ordem molecular de cristais líquidos (CLs)¹ associado com funcionalidades específicas, tais como condutividade, luminescência etc., inseridas em sua estrutura é imenso e importante alternativa para fabricação de dispositivos optoeletrônicos ultraleves, finos, de baixo consumo de energia, baixo custo e mais eficientes que os componentes baseados em semicondutores inorgânicos utilizados atualmente. Moléculas de CLs contendo 1,2,4-oxadiazol² que forem capazes de exibir alinhamento homeotrópico espontâneo são interessantes modelos para estudo de transporte de carga,³ absorção e luminescência polarizada.⁴ Neste contexto, moléculas simples contendo a estrutura de 3,5-diaril-1,2,4-oxadiazóis (**5a-e**) foram sintetizadas, e suas propriedades mesomórficas, ópticas e de alinhamento homeotrópico foram avaliadas.

Resultados e Discussão

Os compostos (**5a-e**) foram sintetizados de acordo com o Esquema 1. As moléculas finais são baseadas na estrutura do 3,5-diaril-1,2,4-oxadiazol com elevada conjugação π , contendo uma longa cadeia alifática em uma das extremidades e grupos polares e/ou polarizáveis na outra. Este tipo de estrutura é conhecido por gerar fase nemática (N). Devido à presença de grupo halogênio ou nitro, são facilmente orientadas de forma a exibir alinhamento homeotrópico, importante para aplicações tecnológicas de CLs. Compostos **5c** e **5d** com Br e I, respectivamente, foram já explorados pelo autor como intermediários para acoplamento de Sonogashira,² contudo sem o estudo de suas fases. Demais compostos são inéditos. Todas as estruturas dos intermediários e moléculas finais foram caracterizadas por análises de IV, RMN ¹H e ¹³C e GC-MS.

As propriedades líquido cristalinas (LCs) dos compostos foram estudadas por Microscopia Óptica de Luz Polarizada (MOLP). Com exceção do composto **5d**, todos exibem fases LCs termotrópicas em faixas de temperatura variando entre 70 e 156 °C. **5e** apresenta ampla faixa LC de SmA de 117 a 156 °C. A transição da fase SmA para N em **5a-b** é precedido por um alinhamento homeotrópico das moléculas, observado por MOLP.

35ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química



Esquema 1. Rota sintética para os compostos **5a-e**.

Este mesmo efeito também é facilmente obtido esfregando a amostra, na fase LC, entre duas lâminas de vidro. Em adição, todos os compostos apresentam luminescência azul em solução e em filme.

Conclusões

Uma série de compostos **5a-e** foram sintetizados e caracterizados. Análises por MOLP das texturas exibidas pelas fases LCs revelaram fases N e SmA, ambas homeotrópicas por natureza. Tais moléculas funcionam como minibastões facilmente alinhando-se numa direção preferencial, quando na fase LC. Estudo sobre o efeito do alinhamento homeotrópico na polarização da luminescência está atualmente em progresso em nosso laboratório.

Agradecimentos

UFPB, M.G.B.C. agradece REUNI-UFPB pela bolsa

¹ Bai, Y. e Abbott, N.L. *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 548.

² Cristiano, R.; Vieira, A. A.; Filho, R. A. W. N.; Gallardo, H. e Srivastava, R. M. *Synthesis*, **2008**, 605.

³ Yasuda, T.; Shimizu, T.; Liu, F.; Ungar, G. e Kato, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 13437.

⁴ Alliprandini-Filho, P.; Borges, G.F.; Calixto, W.B.; Bechtold, I.H.; Vieira, A.A.; Cristiano, R.; Gallardo, H.; Silva, R.A.; Neto, N.M.B.; Marletta, A. *Chem. Phys. Lett.*, **2010**, *487*, 263.