

Cristais Líquidos Quirais Derivados de 1,2,4-Oxadiazol

Rafael Levi Coelho (PG)^{1*}, Iêda Maria Begnini (PQ)², Adriana Demmer da Silva (PG)², Thiago Caique Alves (PG)², Renato Liberato Dallabona (PG)²

¹ Laboratório de Síntese de Cristais Líquidos e Materiais Moleculares Funcionais, CFM, Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), 88040-900, Florianópolis – SC.

² Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau (FURB), 89012-900, Blumenau – SC.

E-mail: r.l.coelho@posgrad.ufsc.br

Palavras Chave: cristais líquidos, 1,2,4-oxadiazol, síntese orgânica.

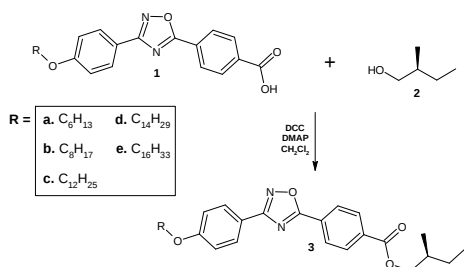
Introdução

Heterociclos de cinco membros, como o 1,2,4-oxadiazol, tem sido estudados extensivamente em inúmeros trabalhos^{1,2,3}. Quando introduzido entre centros rígidos, favorece o aparecimento de mesomorfismo, elevando a polarizabilidade e alterando a anisotropia geométrica.

A quiralidade em cristais líquidos modifica o alinhamento e o macro-arranjo molecular. Como as mesofases são fluidas, porém anisotrópicas, as propriedades físicas do mesógeno também são modificadas⁴. Este trabalho relata a síntese e o estudo das propriedades mesomórficas de uma série de cristais líquidos quirais, de forma a complementar os trabalhos apresentados no XVII e XVIII Encontros de Química da Região Sul.

Resultados e Discussão

A série de ésteres quirais líquido cristalinos **3** foi sintetizada conforme descrito no Esquema 1, reagindo-se os precursores **1**, 3,5-difenil-1,2,4-oxadiazóis ácidos com diferentes cadeias carbônicas, por esterificação com (S)-(-)-2-metil-1-butanol **2**, em DCC, DMAP e CH₂Cl₂.



Esquema 1.

Os ésteres quirais **3** foram caracterizados por técnicas espectroscópicas de IV e RMN de ¹H e de ¹³C, onde **3a** e **3b** já foram discutidos em trabalhos anteriores. Assim, **3c**, **3d** e **3e** serão apresentados neste trabalho.

As análises realizadas por microscopia óptica de luz polarizada (MOLP) revelaram que os ésteres **3a** a **3d** apresentaram mesomorfismo nemático quiral (N*) monotrópico, Tabela 1. No entanto, o éster **3e** apresentou forte tendência cristalização quando

analisado por MOLP, e a mesofase não pôde ser observada ou caracterizada.

Tabela 1. Temperaturas de transição de fase (°C) e rendimentos (%) dos ésteres quirais **3**.

Composto	Aquecimento	Resfriamento	Rend.
3a	K 68,7 I	I 64,6 N* 44,4 K	43
3b	K 79,7 I	I 71,0 N* 66,0	37
3c	K 82,6 I	I 76,5 N* 74,7 K	26
3d	K 82,5 I	I 76,1 N* 75,2 K	56
3e	K 80,4 I	I 77,9 K	27

As micrografias das mesofases dos ésteres quirais **3** revelam texturas características de (N*) como *oily streaks* e *fan-like*, quando comparadas à literatura⁵.

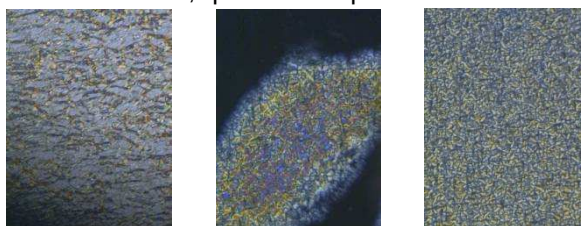


Figura 1. Micrografias das texturas de **3a** (49,7°C), **3c** (76,1°C) e **3d** (75,8°C).

Conclusões

Assim como **3a** e **3b**, **3c** e **3d** apresentaram mesomorfismo nemático quiral (N*) monotrópico, sendo que **3e** apresentou forte tendência à cristalização, não permitindo a visualização de mesofase por MOLP. Acredita-se que variações estruturais que tornem a molécula mais rígida podem favorecer o aumento da faixa de existência da mesofase, bem como o surgimento de mesofases mais organizadas, como as esmécticas, por exemplo.

Agradecimentos

CAPES/Prosup, BIBIC/CNPq, FURB e UFSC.

¹ Santos, D. R.; et al. *Arkivoc*, **2008**, xvii, 157.

² Gallardo, H.; et al. *Tetrahedron*, **2011**, 67, p. 9491-9499.

³ Torgova, S. I. *Pramana Journal of Physics*, **2003**, 61, 2, p. 239-248

⁴ Kitzerow, H.-S. *Chirality in Liquid Crystals*, Springer-Verlag, **2001**.

⁵ Dierking, I. *Textures of liquid crystal*, Willey-Vhc Verlag VMGH & Co., **2003**.