

Núcleo Isoxazol em Cristais Líquidos Curvos

Rafaela R. da Rosa^{1*} (PG), Guilherme D. Vilela¹ (PG), Aloir A. Merlo¹ (PQ).

¹Instituto de Química, UFRGS, Av. Bento Gonçalves, 9500, Campus do Vale, Porto Alegre, RS, Brasil.

*rafaraupp@gmail.com

Palavras Chave: Cicloadição [3+2] 1,3-dipolar, isoxazol, acomplamento de Sonogashira, cristais líquidos curvos.

Introdução

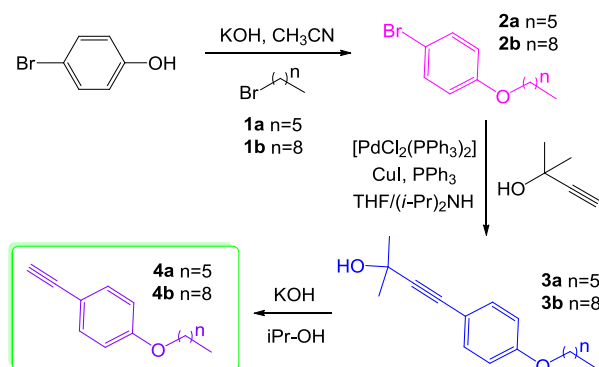
Recentemente uma nova classe de cristais líquidos tem atraído grande interesse científico por poderem exibir uma variedade ímpar de mesofases, algumas com potencial aplicação nas tecnologias de LCD emergentes. Esses compostos caracterizam-se por terem um núcleo rígido não-linear, e são chamados de *bent-core mesogens* (núcleo mesogênico curvado) que devido a muitas variações estruturais são chamados também de *banana-*, *boomerang-*, *hockey-stick* e *V-shaped mesogens*¹.

As fases líquido-cristalinas de moléculas com núcleos curvos têm tido grande interesse pelas suas propriedades polares e quirais não usuais, assim como seu inusitado comportamento coletivo, incluindo a formação de estruturas macroscópicas quirais a partir de moléculas aquirais.²

Nesta comunicação informamos a síntese de cristais líquidos não lineares contendo em seu núcleo o heterociclo isoxazol.

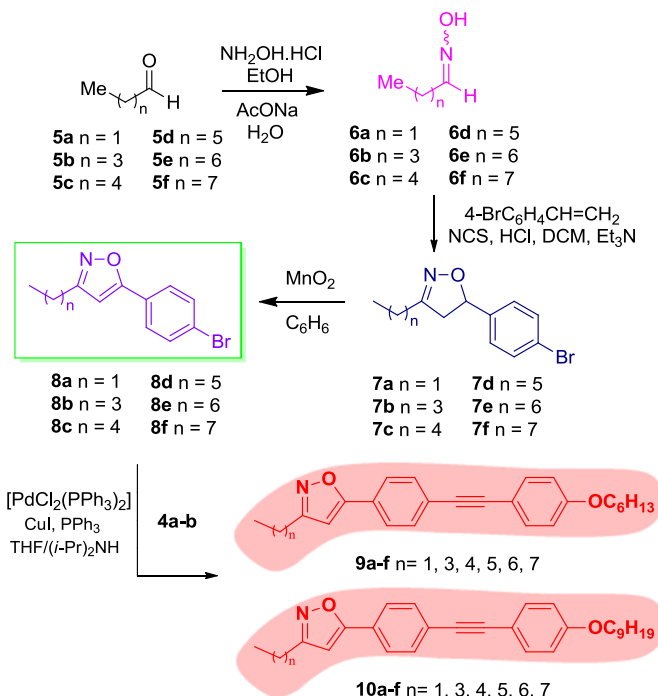
Resultados e Discussão

A estratégia para a síntese dos cristais líquidos começa com a alquilação do 4-bromofenol com o 1-bromohexano (**1a**) e o 1-bromononano (**1b**). A segunda etapa é a preparação dos alcinos protegidos via acoplamento de Sonogashira entre o comercialmente disponível 2-metil-3-butin-2-ol e os correspondentes 4-alcóxibromobenzenos, com sua posterior desproteção (Esquema I).



Esquema I. Preparação dos arilacetilenos terminais.

Os alcinos terminais **4a-b** serão utilizados em uma segunda reação de acoplamento de Sonogashira com os isoxazóis **8a-f** previamente preparados por meio da sequência de reações de oximação, cicloadição [3+2] 1,3-dipolar e oxidação³ (Esquema II).



Esquema II. Preparação dos cristais líquidos.

A série completa está em fase de preparação. Observou-se para os compostos **10b** e **10e** mesofases esméctica A e cristal E. A diminuição de 9 para 6 carbonos na cadeia dos compostos **4** pode implicar em mudanças no empacotamento e possivelmente gerar mesofases banana.

Conclusões

Apesar da forma molecular tipo bastão de *hockey* dos compostos **10b** e **10e** possuir curvatura podendo gerar empacotamentos polares e mesofases banana, as texturas observadas por MOLP e análises de DSC indicaram a presença de fases esméctica A e cristal E, as quais são típicas de sistemas calamíticos. A variação do comprimento das cadeias alifáticas terminais é importante e será avaliada no decorrer da síntese da série completa.

Agradecimentos

À FAPERGS, à CAPES-Programa PROCAD, ao CNPQ e ao INCT-Catálise pelo apoio.

¹ Francescangeli, O.; Samulski, E. T. *Soft Matter* **2010**, 6, 2413-2420.

² Mathews, M.; Zola, R. S.; Yang, D.-k.; Li, Q. *J. Mater. Chem.* **2011**, 21, 2098-2103.

³ Vilela, G. D.; Rosa, R. R.; Schneider, P. H.; Bechtold, I. H.; Eccher, J.; Merlo, A. A. *Tetrahedron Lett.* **2011**, 52, 6569-6572.