

Síntese de Organogéis Líquido Cristalinos contendo espaçador amida e grupo lateral polar

Paulo Henrique dos Santos Ferreira (IC)*, Marília Gabriela Belarmino Cabral (PG) e Rodrigo Cristiano (PQ). * ph_pb@hotmail.com

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

Palavras Chave: organogel, cristal líquido, amida.

Introdução

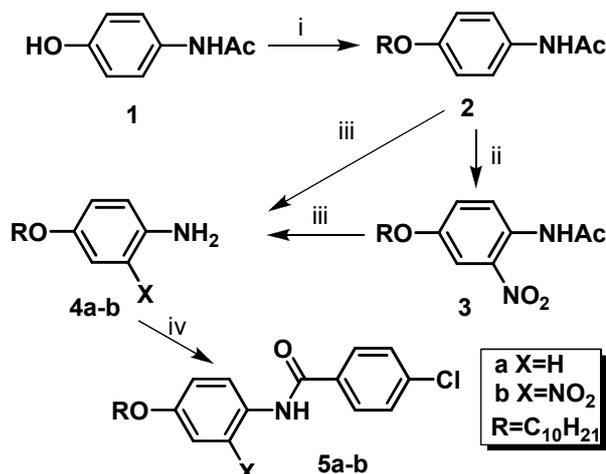
O desenvolvimento de materiais orgânicos funcionais para aplicações optoeletrônicas vem atraindo a atenção de academia e indústria nas últimas duas décadas.¹ O controle de interações intermoleculares tais como ligações de H, interações iônicas e de transferência de carga, assim como estapeamento π - π e forças de van der Waals, é fundamental para o design de materiais moles. Moléculas contendo em sua estrutura partes incompatíveis (tais como uma polar e outra apolar), induzem segregações de fase em uma escala nanoscópica, podendo formar fases líquido-cristalinas (LCs)² e/ou a geração de superestruturas fibrilares que podem reter moléculas de solvente (gel)³. O trabalho apresenta a síntese e caracterização de duas novas moléculas anisotrópicas **5a-b** contendo grupo polar nitro lateral e espaçador amida, capaz de gerar superestruturas por ligações de hidrogênio.

Resultados e Discussão

As moléculas-alvo **5a-b** foram obtidas pela rota de síntese mostrada no Esquema 1. O desenho da molécula consiste em uma forma de bastão anisotrópica com um espaçador amida, e grupo cloro em uma extremidade e uma longa cadeia alifática apolar na outra. Grupo espaçador amida não é muito explorado em cristais líquidos devido ao fato que ele aumenta o p.f. das amostras, inviabilizando sua utilidade em LCDs. Contudo, o grupo amida contém sítios de ligação de H, que pode levar a sistemas automontados por ligações não-covalentes (SALNC). Nosso objetivo aqui foi aliar a anisotropia da forma molecular, típica de estrutura capaz de gerar fases LCs, com a habilidade de formar SALNC. Essa habilidade é bastante promissora para geração tanto de fases LCs como de géis estáveis. Em adição, um grupo polar nitro lateral na molécula gera uma estrutura altamente polarizável, potencializando a formação de SALNC.

Assim, a síntese foi efetuada em 4 etapas, partindo-se do paracetamol **1**: O-alkilação, nitração, hidrólise do grupo acetila seguido pela reação com cloreto de p-clorobenzoíla. Os compostos foram caracterizados por IV, RMN ¹H e ¹³C, GC-MS.

35ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química



i. RBr, K₂CO₃, butanona, refluxo 4h (87%); ii. HNO₃, HOAc, 25 °C 2h (60%); iii. KOH, MeOH/H₂O refluxo 20h (50 e 69%); iv. Cloreto de p-clorobenzoíla, EtN₃, CH₂Cl₂ refluxo 17h (73 e 90%)

Esquema 1. Síntese das moléculas-alvo **5a-b**.

Análises iniciais das amostras de **5a-b** por Microscopia Óptica de luz polarizada (MOLP) indicam a formação de estruturas lamelares, embora não apresentem fases LC. Os compostos finais não foram capazes de gerar géis estáveis em uma variedade de solventes polares e apolares.

Conclusões

Moléculas **5a-b** em forma de bastão, contendo sítios de ligação de H com espaçadores amida foram sintetizadas e caracterizadas. Tais compostos não apresentam fases LCs, embora tenham anisotropia de forma adequada para formação de SALNC. No momento, estamos trabalhando na substituição de grupo Cl terminal por grupo nitro mais polar, e também por cadeias alifáticas apolares. Tais modificações estruturais seguem o curso natural da nossa constante busca pelo entendimento entre estrutura química e propriedades mesomórficas exibida pelos compostos.

Agradecimentos

UFPB/PIBIC

¹ Kato, T.; Mizoshita, N. e Kishimoto, K., *Angew. Chem.-Int. Ed.* **2006**, 45, 38.

² Ichikawa, T.; Yoshio, M.; Hamasaki, A.; Kagimoto, J.; Ohno, H. e Kato, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 2163.

³ George, M. e Weiss, R.G. *Acc. Chem. Res.*, **2006**, 39, 489.