

Síntese e caracterização de materiais colunares automontados por ligações de Hidrogênio derivados do centro 1,3,5-triazina

Juliana M. Poletti (IC)*, Marília G. B. Cabral (PG) e Rodrigo Cristiano (PQ)

* julianampoletti@hotmail.com

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

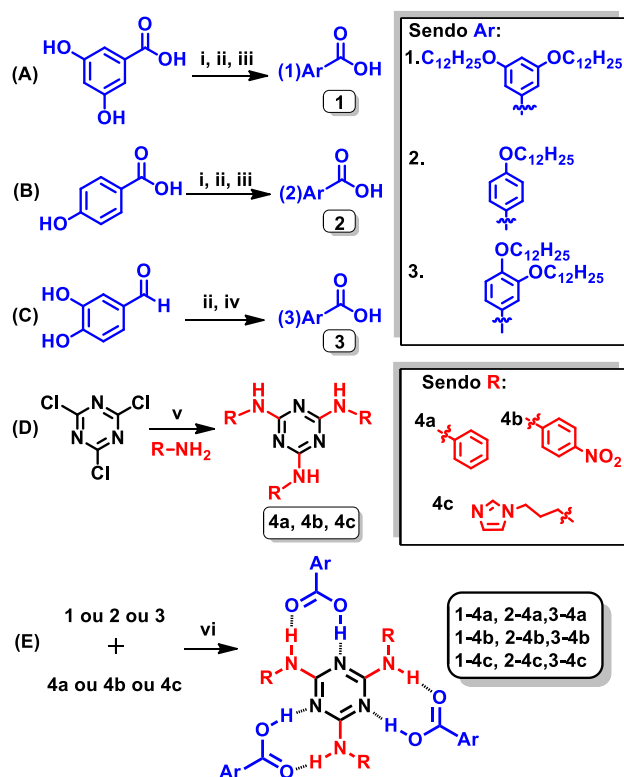
Palavras Chave: Cristais Líquidos, Ligação de Hidrogênio, automontagem, triazina

Introdução

Sistemas automontados por ligação de hidrogênio (LH) podem gerar dispositivos com reversibilidade de propriedades como transporte de carga.^{1,2} Neste trabalho, moléculas finais foram projetadas contendo o centro 1,3,5-triazina, o qual possui uma geometria adequada para o *design* de moléculas discóticas³, e com sítios receptores e doadores de LH, capazes de gerar fases líquido cristalinas colunares através de LH com ácidos alcoxibenzóicos com longas cadeias alquílicas em diferentes posições. A síntese e caracterização química e térmica destes materiais é apresentada neste trabalho.

Resultados e Discussão

A rota sintética para obtenção dos compostos discóticos se encontra no **Esquema 1**.



i. CH_3OH , H_2SO_4 , refluxo; ii. $C_{12}H_{25}Br$, K_2CO_3 , 2-butanona; iii. a) $NaOH$, $MeOH$, refluxo; b) HCl ; iv. $KMnO_4$, $AcONa$; v. K_2CO_3 , 1,4-dioxano (demais condições, tabela 1); vi. THF.

Esquema 1. Rota sintética para as moléculas-alvo.

Em especial, para o composto intermediário **4c** foram avaliadas duas rotas sintéticas (**Tabela 1**) buscando bons rendimentos. Contudo, apenas 40% do trîmero foi isolado usando EtN_3 como base.

Tabela 1: Condições de síntese para o **4a**.

Rota	Solvente	Base	Tempo (refluxo)	Rend.
1	MeOH	K_2CO_3	56h	25%
2	MeOH	EtN_3	56h	40%

A eficiência da complexação foi avaliada por IV. Foram observados deslocamentos referentes aos estiramentos do grupo $C=O$ (ácido carboxílico) para maiores comprimentos de onda e do grupo $C=N$ (centro triazínico) para menores. Análises preliminares de MQLP confirmaram propriedades líquido-cristalinas. As moléculas **1-4a**, **2-4a** e **3-4a** mostraram um crescimento dendrítico no resfriamento, o que pode indicar fases colunares hexagonais (Col_H) (**Figura 1**). DSC e Raio-X ainda serão necessárias para confirmação e completa caracterização das mesofases.

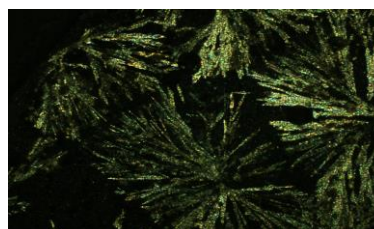


Figura 1: Fotomicrografia obtidas por MQLP (33x) durante resfriamento do composto **1-4b** ($T = 175^\circ C$).

Conclusões

Novos materiais colunares automontados por LH foram sintetizados e caracterizados. Análises preliminares do comportamento térmico indicam formação de fase Col_H . Quanto às moléculas-alvo contendo o heterociclo imidazol, pretende-se explorar o próprio nitrogênio básico do imidazol como receptor de LH e também como sítio iônico.

Agradecimentos

UFPB, CNPq e CAPES.

¹ Prabu, N.; Vijayakumar, V.; Mohan, M. *Journal of Molecular Structure.*, **2011**, 994, 387.

² Sakajiri, K.; Hirama, T.; Yasuda, K.; Kutsumizu, S.; Watanabe, J. *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2013**, 86, 940.

³ Cristiano, R.; Eccher, J.; Bechtold, I. H.; Tironi, C. N. Vieira, A. A.; Molin, F.; Gallardo, H. *Langmuir*, **2012**, 28, 11590.