



## SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE CRISTAIS LÍQUIDOS POLARES CONTENDO OS NÚCLEOS ISOXAZOLINA E ISOXAZOL

Fernanda Bergamo\*, Aloir Antonio Merlo

Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

\*fbergamo25@gmail.com

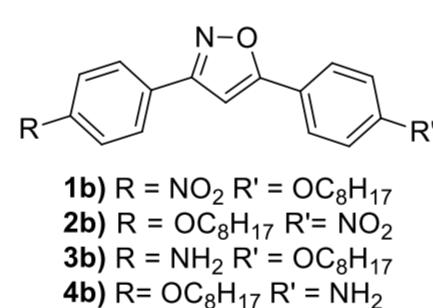
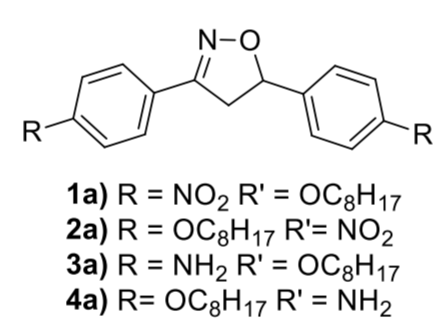
### INTRODUÇÃO

A preparação de novos materiais líquido-cristalinos é bastante importante do ponto de vista do desenvolvimento tecnológico, uma vez que esses materiais apresentam uma rápida resposta eletro-óptica quando estimulados por um campo elétrico externo. Os cristais líquidos banana são uma interessante classe desses materiais que podem ter resposta eletro-óptica ainda maior que determinados tipos de materiais mesomórficos, uma vez que a forma que essas moléculas possuem induzem mesofases polares. Por esse motivo, a síntese e a caracterização desses compostos é de importância para aplicação dessas moléculas em dispositivos eletrônicos.

### EXPERIMENTAL

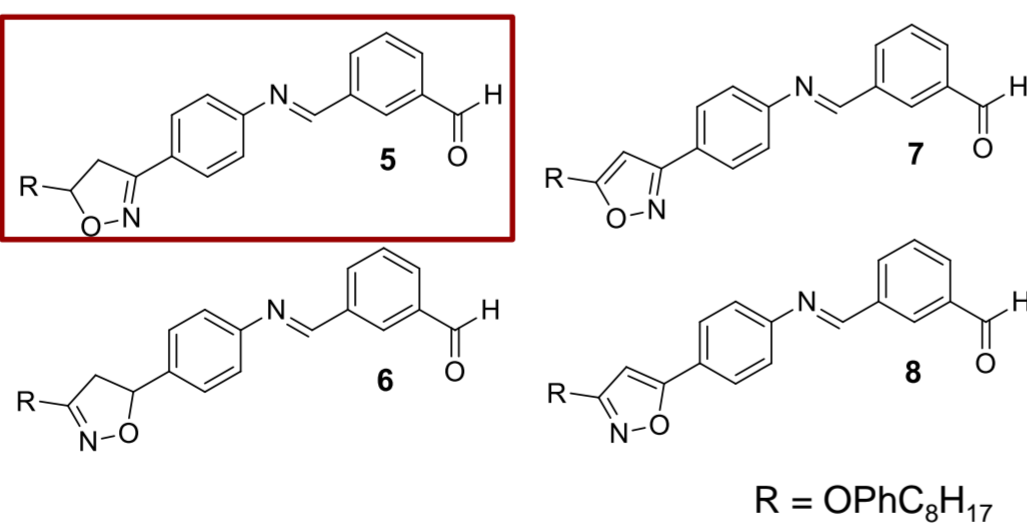
1

Metodologias clássicas de síntese foram empregadas para obtenção dos núcleos isoxazolina e isoxazol, sendo a reação de cicloadição [3+2] 1,3 dipolar a etapa chave da rota sintética. A partir da reação de cicloadição, as isoxazolininas **1a** e **2a** foram sintetizadas para posterior obtenção do núcleo isoxazol **1b** e **2b** através da oxidação das isoxazolininas mencionadas. Todos os intermediários nitro foram reduzidos às respectivas aminas (**3-4a** e **3-4b**), utilizando-se cloreto de estanho (II) dihidratado.



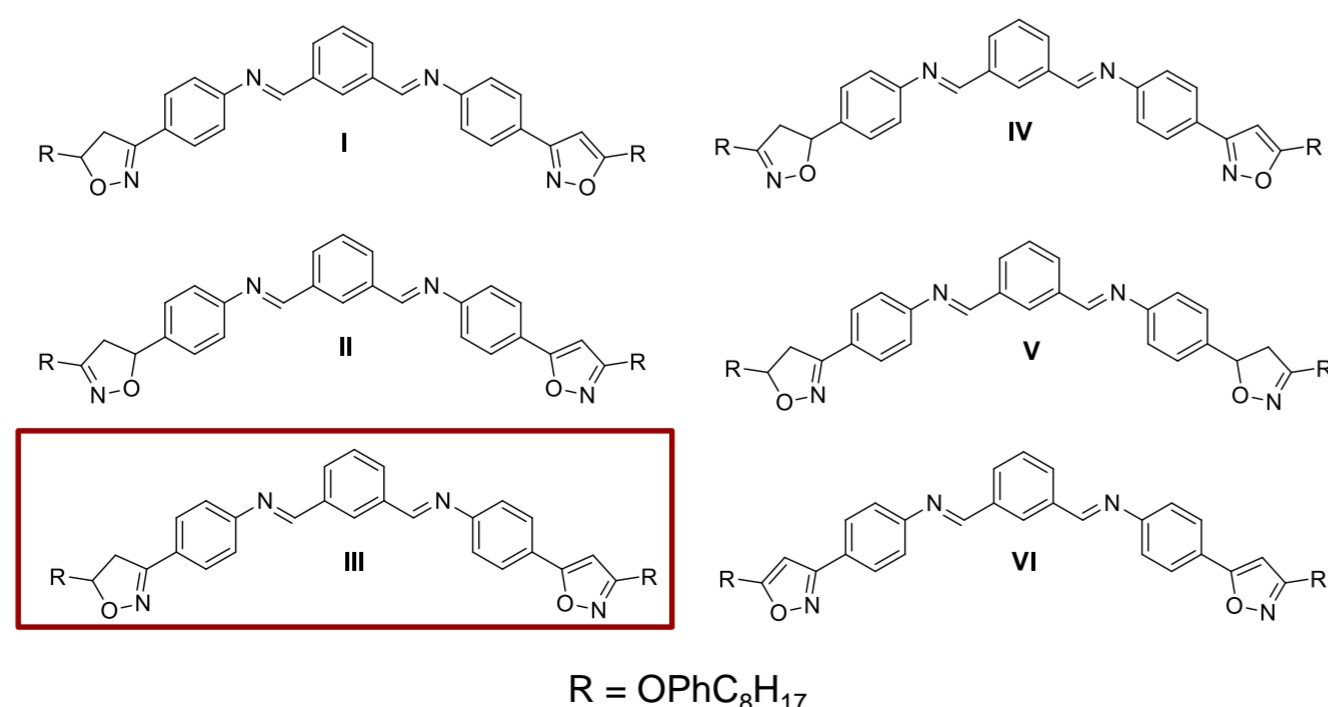
2

As aminas obtidas foram utilizadas na reação com aldeído isoftálico para geração das monoiminas **5-8**. Utilizou-se uma proporção 1:5 (amina:aldeído), com refluxo de duas horas de etanol 95%, sob catálise ácida.



3

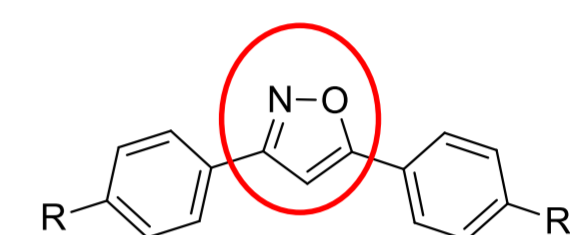
As monoiminas **5-8** foram adicionadas às aminas previamente preparadas para obtenção das iminas não simétricas (**I-VI**).



A proporção de amina:monoimina utilizada seguiu a proporção 1:1, sendo a reação deixada em refluxo de etanol por quatro horas, sob catálise ácida.

### RESULTADOS

Todos os intermediários derivados do anel isoxazol apresentaram comportamento líquido-cristalino que pôde ser visualizado através das texturas obtidas através de microscopia óptica de luz polarizada (MOLP). Os intermediários **2b** e **4b** (Figuras 1 e 2, respectivamente), foram também caracterizados por calorimetria exploratória diferencial (DSC) e difração de raios-X (DRX). Os intermediários **1b** e **3b** também foram caracterizados via MOLP e DSC apresentando mesofases do tipo SmA.



1b) R = NO<sub>2</sub> R' = OC<sub>8</sub>H<sub>17</sub>  
2b) R = OC<sub>8</sub>H<sub>17</sub> R' = NO<sub>2</sub>  
3b) R = NH<sub>2</sub> R' = OC<sub>8</sub>H<sub>17</sub>  
4b) R = OC<sub>8</sub>H<sub>17</sub> R' = NH<sub>2</sub>



O composto **5** foi obtido e caracterizado através do espectro de RMN de <sup>1</sup>H. A partir da obtenção de **5**, a reação com a amina **4b** foi realizada para obtenção de **III**. O composto **III** foi obtido com impurezas e, devido à pequena quantidade de massa obtida, não pôde ser purificado. As condições reacionais para obtenção das monoiminas foram reproduzidas, mas os compostos **6-7** ainda não foram sintetizados, uma vez que os produtos reacionais não foram obtidos, mas sim as iminas simétricas. Além da continuação do curso da rota sintética (intermediários), ainda estuda-se mudanças no protocolo experimental para produção das monoiminas. Embora o composto **III** tenha sido obtido impuro, análises prévias via MOLP mostraram que o composto apresenta, possivelmente, mesofase do tipo B7.



Figura 1. Textura **2b** obtida em 194°C com amostra alinhada (10°C/min). Mesofase SmA.

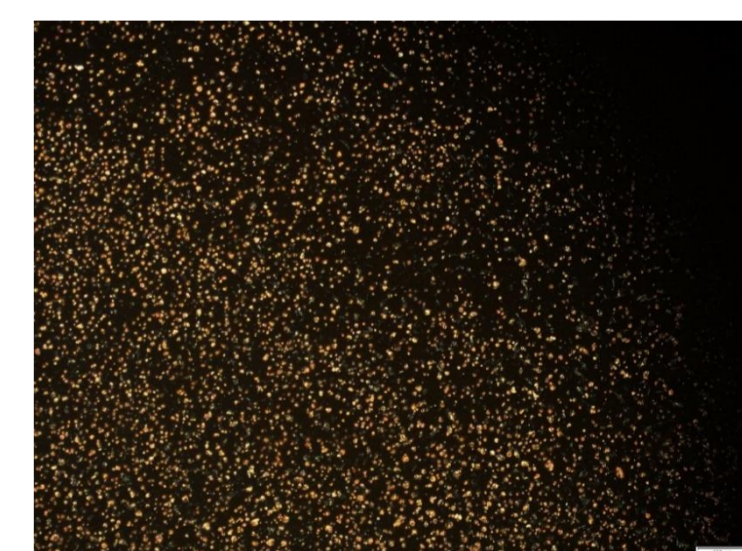


Figura 2. Textura **4b** obtida em 110°C com amostra alinhada (10°C/min). Mesofase SmA.

### CONCLUSÕES

Todos os intermediários derivados do anel isoxazol apresentaram comportamento líquido-cristalino com mesofase do tipo SmA. O composto **2b** apresentou ainda mesofase CrE a temperatura ambiente, característica bastante interessante do ponto de vista de aplicação desses compostos. Observou-se uma forte dependência da presença do anel isoxazol na indução de mesofases, o que pode estar relacionado com a planaridade do anel, que facilita o empacotamento de tais estruturas na faixa de temperatura de mesofase desses compostos.

### AGRADECIMENTOS

