

Novos materiais funcionais anfífilos derivados do isoxazol.

Eric S. Sales (PG)*¹, Aloir A. Merlo (PQ)¹

¹Instituto de Química; UFRGS, Av. Bento Gonçalves, 9500, Cx. P. 15003 - CEP 91501-970, Porto Alegre, RS, Brasil.

*eric.sales@ufrgs.br

Palavras Chave: Síntese Orgânica, Cristais Líquidos, Materiais Funcionais.

Introdução

A síntese de novos materiais funcionais é uma área de grande apelo científico e tecnológico¹. Esses materiais são formados por moléculas orgânicas que respondem a estímulos externos. Cristais líquidos, sensores de luz e pH, géis entre outros são exemplos de materiais funcionais de amplo espectro aplicativo. Neste trabalho descreveremos a preparação de moléculas *anfífilas* com uma extremidade polar (grupo amino, fosfato ou diol) e uma cadeia alifática apolar flexível na outra ponta, contendo um grupo mesógeno (3,5-difenil-isoxazol), conhecido por sua capacidade em promover mesofases liquido-cristalinas² (Figura 1).

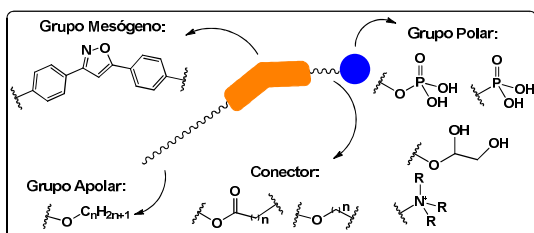
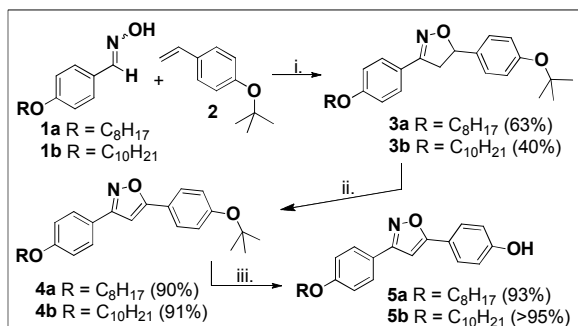


Figura 1. Representação das variações nas moléculas-alvo.

Resultados e Discussão

A estratégia para preparação das moléculas-alvo consistiu primeiramente na obtenção dos fenóis **5a-b** (Figura 2). O anel isoxazol 3,5-disubstituído atua influenciando na organização do material final, enquanto a cadeia alifática garante fluidez e hidrofobicidade.



Esquema I. Rota sintética para obtenção dos fenóis **5**. i. NCS, Et₃N, THF, HCl_{cat}; ii. MnO₂, Tolueno; iii. HBr, AcOH, MeOH.

A partir dos fenóis obtidos prosseguiu-se com a adição de espaçadores alquílicos, responsáveis pela

conexão entre o mesógeno e o grupo polar. Dessa maneira foi possível obter os seguintes intermediários (**6,7**) e produto final (**8**):

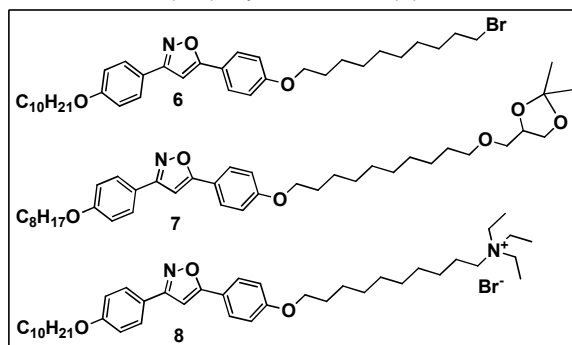


Figura 3. Moléculas anfífilas obtidas.

Esses compostos foram caracterizados por análise de RMN ¹H, ¹³C, IV e MOLP, exibindo interessantes propriedades térmicas (Tabela 1). Ainda serão realizados estudos em solvente para avaliar o comportamento liotrópico desses compostos.

Tabela 1. Estudo das transições térmicas dos compostos **6, 7, 8**.

Isox.	Ciclo	Transições Térmicas (°C) ^a
6	Aquecimento	Cr 92 SmC 123 SmA 144 I
	Resfriamento	I 142 SmA 115 SmC 95 CrX 78 Cr
7	Aquecimento	Cr 72 SmX 98 SmC ^b SmA 109 I
	Resfriamento	I 104 SmA 100 SmC 89 SmX 64 Cr
8	Aquecimento	Cr 126 SmX 140 SmC 155 I
	Resfriamento	I 130 SmC 110 SmX 102 Cr

^a As mesofases foram caracterizadas através das texturas observadas por MOLP. ^b Não determinada.

Conclusões

Neste trabalho foram sintetizadas novas moléculas derivadas do anel (3,5-difenil-isoxazol) com características anfífilas que exibiram interessantes propriedades térmicas. Os produtos e intermediários foram caracterizados por técnicas espectroscópicas e microscopia. Pretende-se avaliar o comportamento dessas moléculas em solução e sintetizar outras variedades de materiais anfífilos.

Agradecimentos



¹ Sangeetha, N.M., *Chem. Soc. Rev.*, **2005**, 35, 821;

² Tavares, A.; Schneider, P. H.; Merlo, A. A. *Eur. J. Org. Chem.* **2009**, 889