



Evento	Salão UFRGS 2018: SIC - XXX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2018
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Síntese e caracterização de cristais líquidos polares contendo os núcleos isoxazolina e isoxazol
Autor	CAROLINE SABRINA BATISTA WEBER
Orientador	ALOIR ANTONIO MERLO

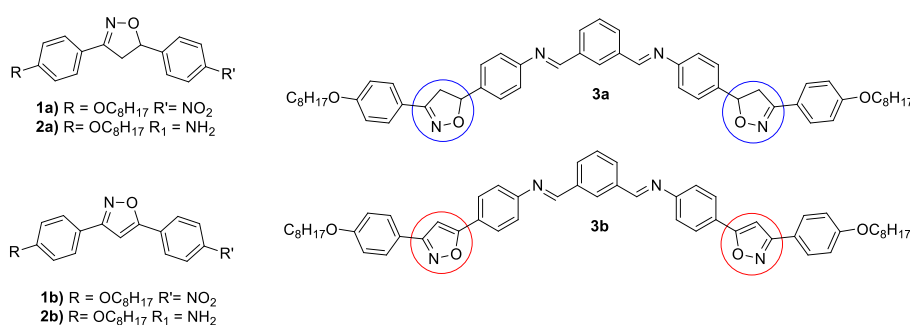
Título do Trabalho: Síntese e caracterização de cristais líquidos polares contendo os núcleos isoxazolina e isoxazol

Bolsista PIBIC/CNPq: Caroline Sabrina Batista Weber

Orientador: Aloir Antonio Merlo

Instituição de Origem: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

A preparação de novos materiais líquido-cristalinos é bastante importante do ponto de vista do desenvolvimento tecnológico, uma vez que esses materiais podem apresentar uma rápida resposta eletro-óptica quando estimulados por um campo elétrico externo. Os cristais líquidos do tipo banana são uma interessante classe desses materiais que podem apresentar características físicas tais como ferroeletricidade e antiferroeletricidade. Essas estruturas podem apresentar uma resposta eletro-óptica ainda maior que determinados tipos de materiais mesomórficos, uma vez que a forma que essas moléculas possuem podem induzir mesofases polares, que apresentam quiralidade macroscópica mesmo sendo originadas a partir de moléculas sem centro assimétrico.¹ Por esse motivo, a síntese e a investigação estrutural desses compostos é de fundamental importância para aplicação dessas moléculas em dispositivos eletrônicos. Na busca pela obtenção de fases polares, a isoxazolina **1a** foi preparada, empregando-se como metodologia sintética a reação de cicloadição [3+2] 1,3 dipolar entre óxidos de nitrila e alcenos. O isoxazol **1b** foi obtido a partir da oxidação da isoxazolina **1a** e, posteriormente, as aminas **2a** e **2b** foram preparadas através da redução do grupo nitro dos compostos **1a** e **1b**, respectivamente. As iminas **3a** e **3b** foram obtidas através da reação entre amina e aldeído isoftálico, sob catálise ácida.



Esquema 1: Núcleos isoxazolina e isoxazol na síntese de cristais líquidos polares.

A imina **3b** derivada do isoxazol apresentou mesofase do tipo banana com arranjo B7. Além disso, os intermediários **1b** e **2b** também apresentaram comportamento líquido-cristalino, ambos do tipo SmA. O intermediário **2b** ainda apresentou mesofase CrE mesmo abaixo da temperatura ambiente. Observou-se uma forte dependência do anel isoxazol na obtenção de compostos líquido-cristalinos, o que pode estar relacionado com o fato do anel isoxazol apresentar planaridade, facilitando o empacotamento de tais estruturas na faixa de temperatura de mesofase desses compostos. Ainda, os compostos **1b**, **2b** e **3b** foram caracterizados por microscopia óptica de luz polarizada (MOLP), calorimetria exploratória diferencial (DSC) e difração de raios-X (DRX). O composto banana com mesofase B7 também foi caracterizado por voltagem triangular, apresentando polarização espontânea de 126 nC/cm² e comportamento antiferroelétrico.

¹ Niori, T., Sekine, T., Watanabe, J., Furukawa, T. & Takezoe, H. Distinct ferroelectric smectic liquid crystals consisting of banana shaped achiral molecules. *J. Mater. Chem.* **6**, 1231 (1996).