



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Análise de transição de fase SmC-SmA de 3,5-diarilisoaxazóis via difração de raios X
Autor	LEONARDO POLONI PAVAN
Orientador	ALOIR ANTONIO MERLO

Análise de transição de fase SmC-SmA de 3,5-diarilisoaxazóis via de difração de raios X.

Materiais líquido-cristalinos (CL) são, frequentemente, utilizados em mostradores ópticos. Dentre eles, aqueles com mesofases esmécticas destacam-se pelas funcionalidades enquanto semicondutores e por seu emprego na composição de membranas transportadores de íons e células solares (1). Nesta comunicação desejamos comunicar nossos estudos de síntese e caracterização de materiais esmetogênicos dissustituídos 3,5-diarilisoaxazóis o estudo da transição de fase SmC para SmA, realizado através das técnicas de: a) microscopia óptica de luz polarizada (MOLP); b) calorimetria exploratória diferencial (DSC); e c) difração de Raio-X (DRX). A preparação dos compostos citados consistiu de diversas etapas sintéticas, sendo as duas principais as reações de cicloadição (3+2) 1,3-dipolar para a obtenção das isoxazolininas, seguido da oxidação, com MnO_2 , produzindo o isoxazol correspondente. Dois isoxazóis com grupo terminal benziloxila foram preparados: **6a**, contendo outro grupo terminal *n*-octila; e **6b**, *n*-decila. A análise por MOLP indicou a presença de polimorfismo Cr – SmC – N – I para *n*-octila e Cr – SmC – SmA – N – I para *n*-decila. A transição de fase SmA para SmC foi detectada por MOLP em 140-142 °C, porém via DSC não foi possível detectar o pico transição de fase SmC para SmA. Considerando a natureza desta, realizou-se um estudo de DRX controlando a temperatura. Os picos dos difratogramas indexados como d_{100} são atribuídos ao espaçamento entre camadas da mesofase SmA e SmC e os valores de 2θ evidencia a redução do espaçamento lamelar proposto para transição de fase. Na faixa de resfriamento de 157 °C até 140 °C, seis difratogramas apresentaram valor constante de $2\theta = 32,13$ Å. Posteriormente em 135 °C e 130 °C, registrou-se picos de difração de $2\theta = 31,55$ e $31,27$ Å, respectivamente, corroborando à hipótese.

Referências:

- (1) Mandle, R. J., et al. Evaluation of 4-alkoxy-4'-nitrobiphenyl liquid crystals for use in next generation scattering LCDs J. W. *RSC Adv.*, **7**, 40480, (2017).