

Síntese de cristais líquidos curvos contendo anel isoxazol

Irwing Schaun Brose*(IC), Aloir Antonio Merlo (PQ), Rafaela R. Da Rosa (PG).

Instituto de Química, UFRGS, Av. Bento Gonçalves, 9500, Campus do Vale, Porto Alegre, RS, Brasil

*E-mail: brose.irwing@gmail.com



UFRGS
PROFESQ
CET - Ciências Exatas e da Terra

XXV SIC
Salão Iniciação Científica

INTRODUÇÃO

A síntese de materiais orgânicos semicondutores com propriedades de cristais líquidos é um campo com grande perspectiva de crescimento por sua aplicação na indústria eletrônica em, por exemplo, semicondutores orgânicos, OLEDs, OFETs, LED, corantes, géis e outros.

O objetivo destes trabalhos é o estudo da influência de um substituinte doador ou receptor de elétrons sobre propriedades líquido-cristalinas de isoxazolinás e isoxazóis.

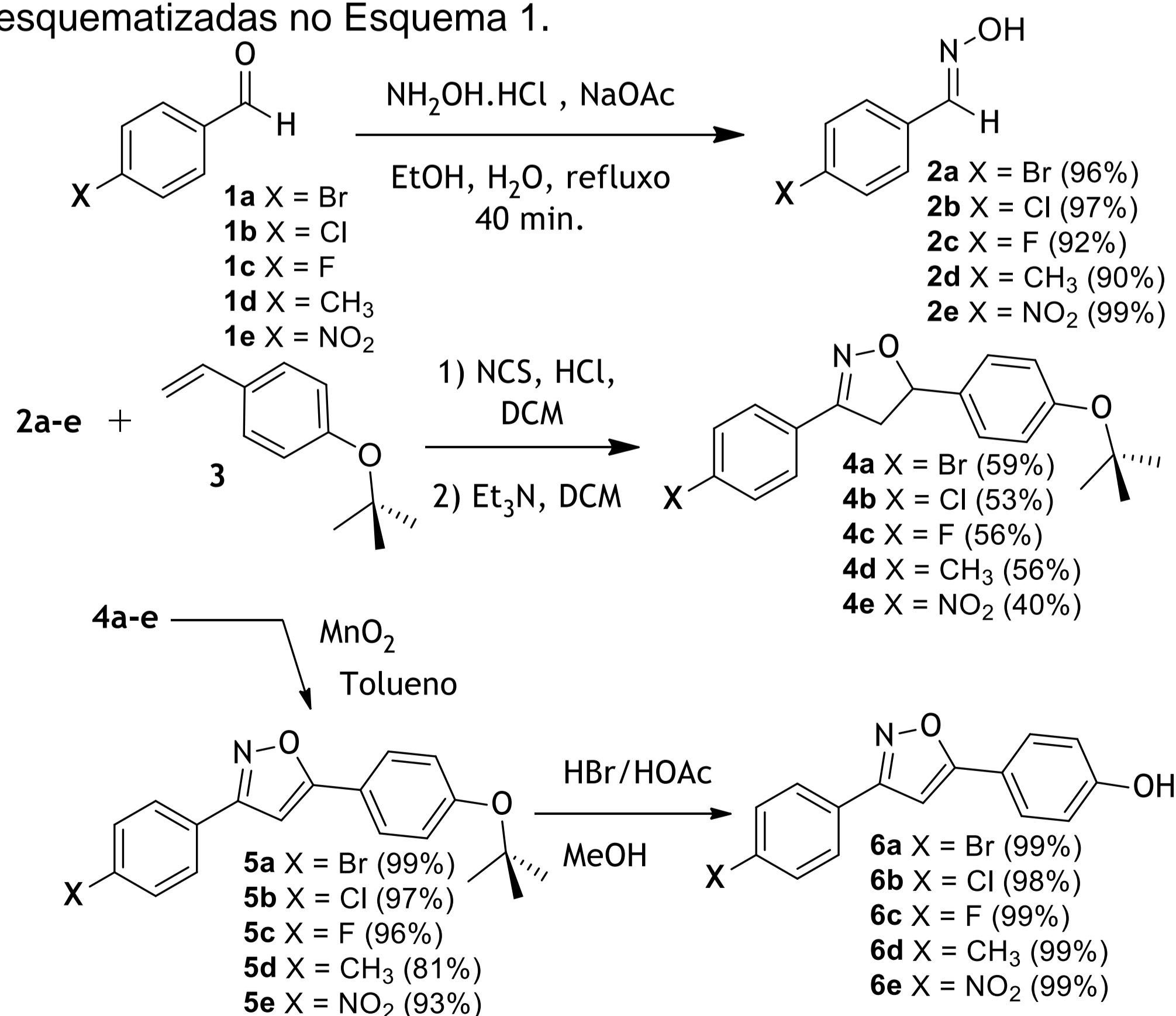
METODOLOGIA

A estratégia para a síntese dos isoxazóis 3,5-dissubstituídos começa com a preparação das oximas **2a-e**, a partir dos aldeídos **1a-e**, os quais são as responsáveis pela formação *in situ* do óxido de nitrila na próxima etapa da rota sintética. Os rendimentos desta etapa ficaram em aproximadamente 90%.

Em seguida, por meio de cicloadição [3+2] 1,3-dipolar, constrói-se o anel isoxazolina utilizando como dipolarófilo, o 4-*t*-butoxiestireno e como gerador de compostos 1,3-dipolares-óxidos de nitrila - ArC≡N-O, as oximas aromáticas geradas anteriormente - **2a-e**.

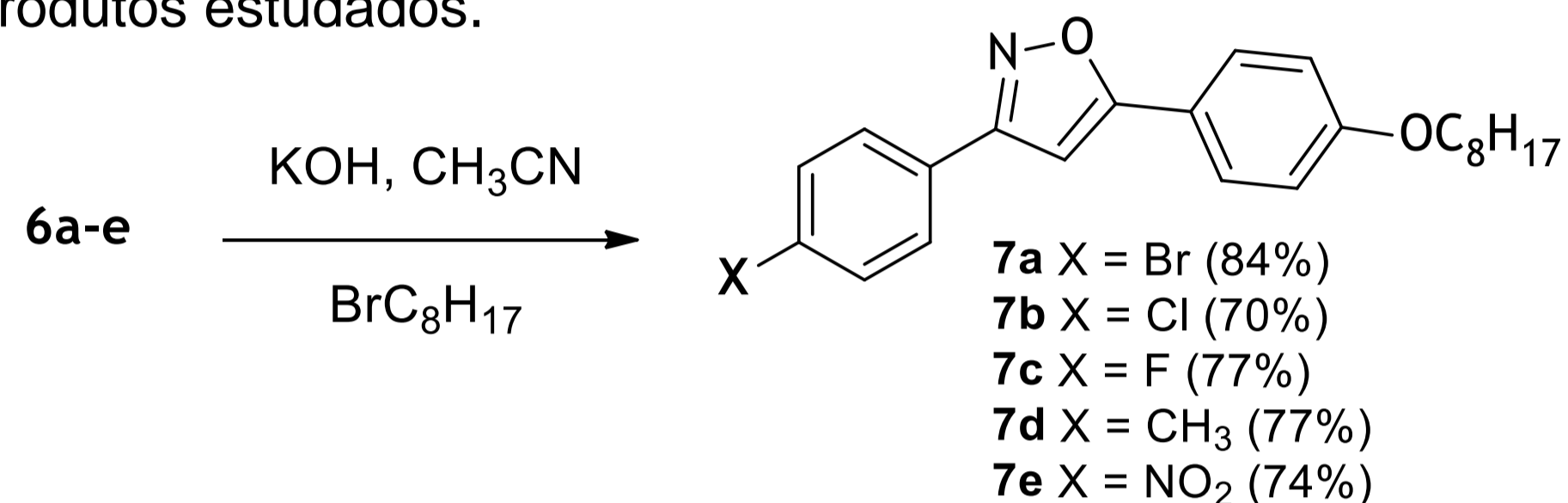
A reação de oxidação das isoxazolinás **4a-e**, geradas na etapa anterior, para os isoxazóis **5a-e** correspondentes introduz uma ligação dupla no anel isoxazolina, aumentando a planaridade e a conjugação da molécula.

Após esta etapa, procedeu-se uma desproteção, removendo o grupo *t*-butil, utilizando-se catálise ácida, gerando assim seus respectivos fenóis **6a-e**. As reações descritas anteriormente são esquematizadas no Esquema 1.

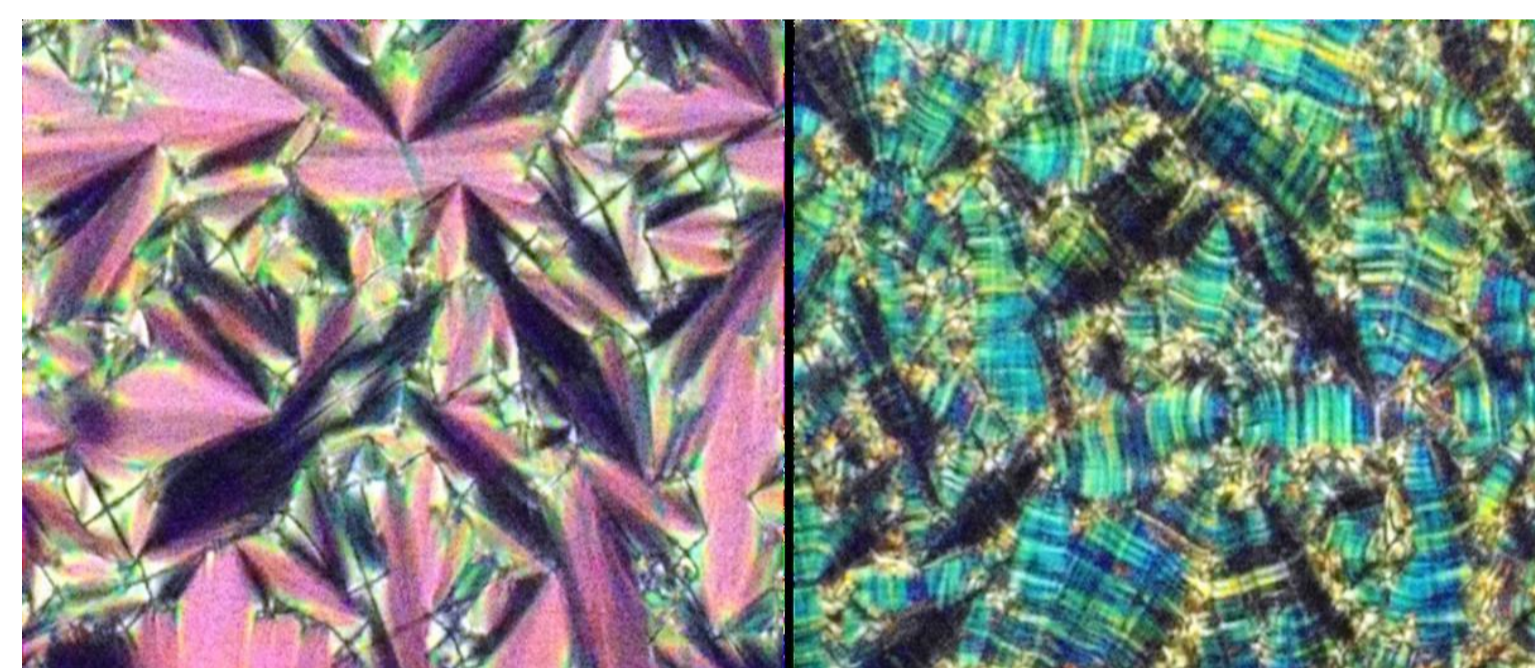


Esquema 1: Síntese de Isoxazóis, Isoxazonila e fenóis

Os fenóis obtidos foram então alquilados utilizando-se 1-bromo-octano. A presença da cadeia alquílica é fundamental para a observação de mesofases em todos os produtos estudados.



Esquema 2: Reação de alquilação a partir de fenóis.



SmA a 140°C, composto **7b** CrE a 85°C, composto **7b**

Composto	X	Cr	CrE	SmA	N	I
7a	Br	•	99	•	-	• 191
7b	Cl	•	96	•	-	• 192
7c	F	•	-	• 97	-	• 154
7d	CH ₃	•	-	• 90	• 124	• 141
7e	NO ₂	•	-	• 120	-	• 194

Tabela 1: Temperaturas de transição no aquecimento (°C) para os compostos **7a-e**

Conclusão e Perspectivas

Os resultados dos trabalhos demonstram a viabilidade da síntese de precursores que serão utilizados no futuro na preparação de materiais orgânicos eletrônicos.

Em trabalhos futuros, serão realizadas polimerizações para continuarmos estudando a influência de substituintes.

Agradecimentos

À FAPERGS, à CAPES, ao CNPq pelo fomento.

- Newman, C. R.; Frisbie, C. D.; *Chem. Matter.*, **2004**, *16*, 4436.
- Ritter, O. M. S.; Giacomelli, F. C.; *Polymer Bull.*, **2006**, *56*, 549.



MODALIDADE
DE BOLSA

PIBIC-CNPq