



|                   |  |
|-------------------|--|
| <b>Evento</b>     | Salão UFRGS 2013: SIC - XXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS |
| <b>Ano</b>        | 2013   |
| <b>Local</b>      | Porto Alegre - RS  |
| <b>Título</b>     | Síntese de Cristais Líquidos                                       |
| <b>Autor</b>      | IRWING SCHAUN BROSE  |
| <b>Orientador</b> | ALOIR ANTONIO MERLO  |

Nesta comunicação estamos informando nossos resultados preliminares relativos a preparação de importantes compostos orgânicos liquido-cristalinos contendo o anel isoxazol para síntese de materiais orgânicos eletrônicos com potencial aplicação como semicondutores orgânicos. A estratégia para síntese dos precursores utiliza uma metodologia sintética principal: a cicloadição [3+2] 1,3-dipolar entre óxidos de nitrila e o alceno 4-*tert*-butoxiestireno. O planejamento sintético inicia da preparação de oximas a partir de aldeídos aromáticos por meio da reação de adição nucleofílica de hidroxilamina. Na etapa seguinte, as oximas são transformadas nos correspondentes óxidos de nitrila via oxidação *in situ* pelo N-diclorosuccinimida (NCS). A captura da espécie reativa 1,3-dipolar pelo respectivo alceno produz a isoxazolina dissubstituída nas posições 3 e 5 do anel heretocíclico, com rendimentos médios na faixa de 55%. A próxima etapa de preparação dos precursores avançados é a reação de oxidação das isoxazolininas aos isoxazóis correspondentes mediada pelo MnO<sub>2</sub> (95%). A reação de oxidação se faz necessária para permitir a conjugação entre os dois anéis aromáticos da molécula, característica necessária na preparação de materiais liquido-cristalinos e semicondutores orgânicos. Partindo-se dos isoxazóis, foi realizada uma reação a fim de remover o grupo *tert*-butil para formação dos seus respectivos fenóis (>99%). Para preparação dos compostos finais, foi realizada uma reação de alquilação dos respectivos fenóis com o 1-bromooctano (~80%), resultando em compostos com diferentes características liquido-cristalinas.

Todos os compostos apresentaram mesofase esméctica A (SmA). Os compostos derivados das 4-halogenobenzaldeidoximas apresentaram mesofases do tipo cristal E, e o composto final derivado da 4-metilbenzaldeidoxima apresentou mesofase nemática. As mesofases foram observadas e identificadas por meio de análise por microscopia óptica de luz polarizada. Os compostos também estão sendo analisados por calorimetria diferencial de varredura (DSC) para avaliação dos parâmetros transicionais (temperatura, entalpia e entropia).