

# Síntese de Dímeros Calamíticos para o Estudo de Propriedades Líquido-Cristalinas e Materiais Orgânicos Funcionais.

Barbara Müller Colasio\* (IC), Dr<sup>a</sup> Rachel Faverzani Magnago (PQ).

barbara.colasio@unisul.br

Palavras Chave: *Cristais líquidos, síntese orgânica, energia solar.*

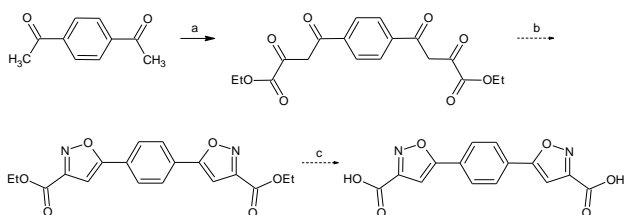
## Introdução

O desenvolvimento de fontes alternativas de energia vem sendo impulsionado devido à busca de energia limpa e renovável, preço acessível, crise energética e busca pela sustentabilidade. A luz solar é um importante meio de energia, sendo que no Brasil é potencialmente favorável para o desenvolvimento de sistemas fotovoltaicos. A energia fotovoltaica pode ser captada através de placas que existem em diversos materiais semicondutores, como é o caso de moléculas orgânicas funcionais. As moléculas propostas foram planejadas de modo a apresentarem requisitos para gerar propriedades líquido cristalinas (auto-organização).

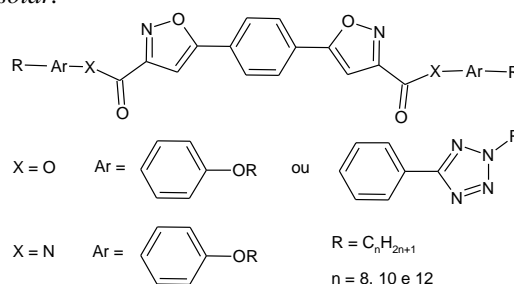
## Resultados e Discussão

Todos os intermediários foram sintetizados com diferentes grupos alquil (octil, decil e dodecil). Para a confirmação das estruturas de todos os intermediários foram realizadas análises de IV, RMN H1 e C13, e também ponto de fusão dos compostos. Foi necessário otimizar reações para prepara-las com pureza e quantidade apropriada para reações posteriores. Estes intermediários são essenciais para obtenção dos compostos finais com características estruturais apropriadas para o estudo de propriedades líquido-cristalina, os compostos são importantes para aplicações tecnológicas de materiais orgânicos funcionais.

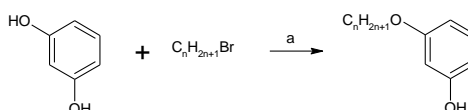
Na figura 1, apresenta-se a preparação do ácido 5,5'-benzeno-1,4-diildiisoxazolil-3-caboxílico. Para obter os compostos diméricos calamíticos, como mostra a figura 2, será preparado o cloreto do ácido com posterior esterificação. As figuras 3, 4 e 5 representam as sínteses de intermediários aromáticos para adição no cloreto do ácido, como indica a figura 2.



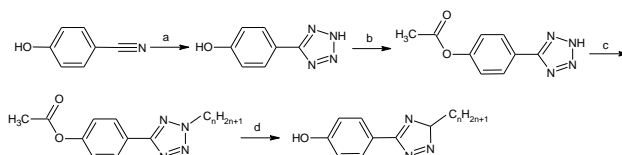
**Figura 1.** Síntese do ácido 5,5'-benzeno-1,4-diildiisoxazolil-3-caboxílico. Condições reacionais: (a) dieteil oxalato, NaH, DME, 0°C, 3 h; (b) NH<sub>2</sub>OH.HCl, Et<sub>3</sub>N, EtOH, reflux, 4 h; (c) SOCl<sub>2</sub>, Δ, 5 h.



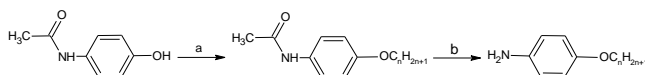
**Figura 2.** Modelo esquemático dos dímeros calamíticos.



**Figura 3.** Síntese do 3-alcóxi-fenol. Condições reacionais: (a) bromoalcano, NaOH<sub>aq</sub> e MeOH.



**Figura 4.** Síntese do 4(2-álquil-2H-tetrazol-5-il)fenila. Condições reacionais: (a) 1. NaN<sub>3</sub>, NH<sub>4</sub>Cl, metiletilcetona, 2. HCl<sub>aq</sub>; (b) 1. NaOH<sub>aq</sub>, anidrido acético, 2. HCl<sub>aq</sub>; (c) Bromoalcano, K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, metiletilcetona; (d) 1.KOH<sub>aq</sub>. etanol, 2. HCl<sub>aq</sub>.



**Figura 5.** Síntese do 4-alcóxi-anilina. Condições reacionais: (a) Bromoalcano, K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> e Butano; (b) KOH<sub>aq</sub> e Etanol.

## Conclusões

As rotas sintéticas propostas foram eficientes para preparar os compostos desejados, 3-alcóxi-fenol, 4-(2-álquil-2H-tetrazol-5-il)fenila, 4-alcóxi-anilina e dietil-4,4'-benzeno-1,4-diilbis(2,4-dioxobutanoato), com diferentes grupos alquil (octil, decil e dodecil).

## Agradecimentos

Bolsa PIBIC/CNPq.

O trabalho teve o apoio técnico do Laboratório de Síntese de Cristais Líquidos da UFSC.

ALCÂNTARA, Alex Sander. *Energia fotovoltaica no Brasil é discutida em evento em São Paulo*. Disponível em:

<<http://www.inovacaotecnologica.com.br/noticias/noticia.php?artigo=en-ergia-fotovoltaica&id=030175100312>>. Acesso em: 20 maio 2010.

COLLE, S.; Pereira, E.B. *Atlas de irradiação solar do Brasil*, Brasília: Instituto Nacional de Meteorologia, 1998.

RENOVÁVEIS, Energias. *Energia solar*. Disponível em:

<<http://www.alternativasenergias.com/energia-solar>>. Acesso em: 20 junho 2010.