

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE 4-PIRIDINIL-4-NONILOXIBENZOATO VISANDO APLICAÇÃO EM CÉLULAS COMBÚSTIVEL

Caroline Moredo Ambrosio¹, Dra. Rachel Faverzani Magnago²

1. Estudante de IC da Universidade do Sul de Santa Catarina – UNISUL; *carolinemambrosio@gmail.com

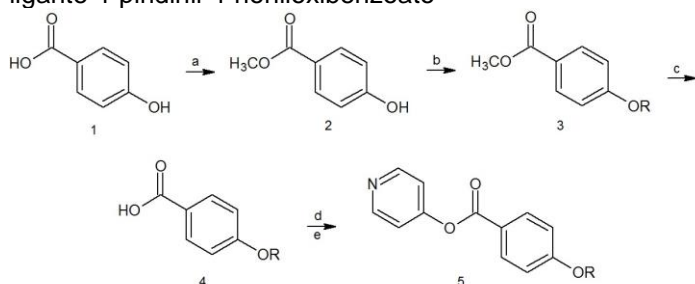
2. Doutora em química orgânica, Palhoça/SC - Orientadora

Introdução

Cristais líquidos contendo são conhecidos como metalomesogênicos, e combinam a possibilidade da química de coordenação com base no metal com as propriedades físicas extraordinárias exibidas por cristais líquidos. Os cristais líquidos termotrópicos possuem aplicações tecnológicas em sistemas nanoestruturados, por exemplo, para uso em células combustíveis, semicondutores, fotocatalisadores e fios ultrafinos. Estas aplicações ampliam a possibilidade de transmissão e geração de energia limpa e fazem com que se tenham componentes eletrônicos de alto desempenho em dimensões nanométricas.

Resultados e Discussão

Figura 1: esquema das reações para preparação do ligante 4-piridinil-4-noniloxibenzoato



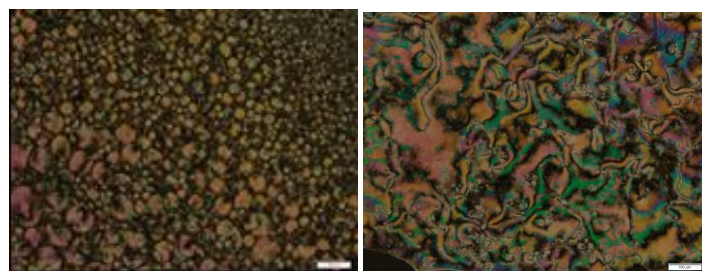
a) MeOH, HCl ; b) K₂CO₃, CH₃COC₂H₅, C₉H₁₉Br ; c) NaOH(aq), C₂H₆O. ; d) SOCl₂, DMF ; e) 4-hidroxipiridina, C₅H₅N.

Fonte: Autor, 2016

Na síntese de 4-hidroxibenzoato de metila (2), foi utilizado como reagente de partida o ácido 4-hidroxibenzoico (1), numa reação de esterificação (a) com álcool metílico e ácido clorídrico, obtendo-se rendimento de 90% e ponto de fusão de 122°C. A partir do 4-hidroxibenzoato de metila (2) foi preparado o 4-noniloxibenzoato de metila (3) por substituição nucleofílica com 1-bromononil, carbonato de potássio em metiletilcetona, obtendo-se rendimento superior a 50%. A hidrólise do 4-noniloxibenzoato de metila para obtenção do ácido 4-noniloxibenzoico (4), foi realizada por refluxo com uma solução aquosa de hidróxido de sódio e etanol, obtendo-se rendimento de 80%. A síntese do 4-piridinil-4-noniloxibenzoato (5) foi obtida em duas etapas (d, e). A primeira etapa (d) foi a preparação do cloreto do ácido, utilizando o ácido 4-noniloxibenzoico como reagente de partida, cloreto de tionila (recém destilado) e dimetilformamida (seco). O cloreto do ácido não foi caracterizado, foi isolado por destilação do excesso do cloreto de tionila e imediatamente utilizado na etapa seguinte. Uma solução de 4-hidroxipiridina em piridina (seca e recém destilada), como solvente, foi vertida sobre o cloreto do ácido, obtendo-se rendimento de 30%.

Todos os intermediários sintéticos foram obtidos com rendimento superior a 50% e foram caracterizados por ponto de fusão que corresponderam com os valores da literatura e foram caracterizados por IV. O ácido 4-noniloxibenzoico tem propriedade de cristal líquido e foi observado mesomorfismo na análise de microscopia ótica. No resfriamento da amostra foram observadas as fases nemática (figura 2) e esmética C (figura 3). O ácido 4-noniloxibenzoico passa do isotrópico para a fase nemática em 124°C, permanecendo até 102°C, entrando na fase esmética e cristalizando a 91,5°C.

Figura 2: Textura Schilieren da mesofase nemática do ácido 4-noniloxibenzoico T= 110°C



Fonte: Autor, 2016.

O ligante final 4-piridinil-4-noniloxibenzoato foi testado de diversos modos e foi obtido com rendimento de 30% e ponto de fusão de 47,8°C.

Conclusões

O ácido intermediário 4-noniloxibenzoico obtido exibiu propriedade de cristal líquido. O ligante final 4-piridinil-4-noniloxibenzoato foi obtido com sucesso.

Palavras-chave

Cristal-líquido, Piridil, Mesofase.

Instituição de apoio

Universidade do Sul de Santa Catarina – UNISUL
Programa institucional de bolsas de iniciação científica - PIBIC – CnpQ

Referências

- MAGNAGO, Rachel Faverzani. Síntese e caracterização de mesógenos e metalomesógenos calamíticos de Ag(I) e Pb(II). 2002.
- MAGNAGO, Rachel Faverzani. Síntese de intermediários quirais e de cristais líquidos derivados do (S)-(-)-lactato de etila. 1996.
- GALLARDO, H.; CONTE, G.; BORTOLUZZI, A. J.; BECHTOLD, I. H.; PEREIRA, A.; Quirino, W. G.; Legnani, C.; Cremona, M. Synthesis, structural characterization, and photo and electroluminescence of a novel terbium(III) complex. *Inorganica Chimica Acta*, 365, 152-158, 2011.