

DERIVAȚI DE OXADIAZOL CU PROPRIETĂȚI DE CRISTAL LICHID

Doctorand ing. Elena-Raluca Cioancă, conducător științific profesor Dan Scutaru

Deși au fost descoperite în secolul XIX, cristalele lichide își găsesc o aplicabilitate largă în tehnica modernă abia spre mijlocul secolului XX. Studiul cristalelor lichide neconvenționale s-a intensificat în ultimii ani ca urmare atât a dezvoltării tehnicilor de analiză în vederea confirmării structurii acestora cât și a metodelor de sinteză organică modernă.

Scopul tezei de doctorat cu titlul *“Derivați de oxadiazol cu proprietăți de cristal lichid”* a fost sinteza, caracterizarea structurală și a proprietăților lichid cristaline a unor compuși ce conțin un nucleu central de [1,3,4]oxadiazol 2,5-disubstituit și care să prezinte un tip neconvențional de mezofază, mezofază nematică biaxială. Structura compușilor sintetizați a fost confirmată spectral (^1H -RMN, ^{13}C -RMN, spectrometrie de masă și IR), iar comportamentul lichid cristalin a fost investigat prin calorimetrie diferențială și microscopie optică în lumină polarizată. Aspectele privind termostabilitatea compușilor au fost investigate prin metode termogravimetrice. Pentru elucidarea modului de organizare a moleculelor în cadrul mezofazei și a explicării comportamentului lichid-cristalin, au fost realizate o serie de simulări moleculare cu ajutorul programului Materials Studio 4.0 - Accelrys.

Teza de doctorat este extinsă pe 198 pagini ce includ 146 figuri, 38 tabele, 11 scheme de reacții și 139 referințe bibliografice.

În prima parte (STUDIUL DE LITERATURĂ) a tezei de doctorat, este prezentat studiul actual al cercetărilor în domeniu. Capitolul este structurat în mai multe părți, ce acoperă, într-o succesiune logică diversele aspecte legate de studiul cristalelor lichide și al cristalelor lichide cu potențială biaxialitate.

În partea a II-a, CONTRIBUȚII ORIGINALE, sunt prezentate rezultatele cercetărilor proprii.

În **capitolul II** sunt prezentate succint sintezele și caracterizarea structurală a trei unități de miez [1,3,4]oxadiazolic 2,5-disubstituit, care prezintă grupe reactive de tip amino sau hidroxi: 2,5-bis-(4-aminofenil)-[1,3,4]oxadiazol (BAO), 2,5-bis-[(4-hidroxifenilazo)-4-fenil]-[1,3,4]oxadiazol (BAO1) și 2-(4-metoxifenil)-5-(4-hidroxifenil)-[1,3,4]oxadiazol (BHO1).

Capitolul III tratează sinteza și caracterizarea unor grupări mezogene ce conțin conexiuni de tip azo, capabile de izomerizare *cis-trans* sub acțiunea radiațiilor UV. Obținerea acestora s-a realizat prin reacții de diazotare, cuplare, eterificare Williamson și esterificare.

În cadrul **capitolului IV** au fost sintetizate 13 baze Schiff simetrice cu structură bent-core, care au prezentat proprietăți lichid cristaline.

Cercetările efectuate în cadrul **capitolului V** au avut în vedere sinteza și caracterizarea unor derivați simetrici ai [1,3,4]oxadiazolului 2,5-disubstituit. Ca unitate de miez a fost utilizat 2,5-bis-[(4-hidroxifenilazo)-4-fenil]-[1,3,4]oxadiazolul (BAO1). S-a obținut un număr de 7 compuși cu proprietăți de cristal lichid enantiotrop sau monotrop.

Capitolul VI prezintă sinteza, caracterizarea structurală, modelarea moleculară și proprietățile lichid cristaline ale unor derivați asimetrici de [1,3,4]oxadiazol care au prezentat proprietăți lichid cristaline.

Studiile de termostabilitate ale compușilor finali și ale grupărilor mezogene sunt detaliate în **capitolul VII**.

Capitolul VIII detaliază metodele de sinteză utilizate pentru obținerea compușilor prezentați în teza de doctorat.

Concluziile prezintă principalele rezultate obținute în cursul cercetărilor efectuate, cu accentuarea aspectelor originale.

Rezultatele cercetărilor proprii din cadrul tezei de doctorat s-au concretizat în elaborarea a 5 lucrări publicate sau în curs de publicare în reviste ISI, 2 lucrări publicate în reviste naționale și 6 comunicări sau postere prezentate la conferințe naționale și internaționale. De asemenea, rezultatele cercetărilor din cadrul tezei de doctorat au fost incluse în **2 granturi** de cercetare: **PNII – IDEI (2008-2011)** în calitate de membru în colectiv și un grant de tip **Td cod CNCIS 65 (2007-2008)** în calitate de director de proiect.