

## Síntese e caracterização de compostos fluorescentes em forma de V derivados do 5,6-dibromo-2,1,3-benzotiadiazol.

Behramand (PG), Fernando Molin (PQ), Hugo Gallardo\* (PQ). \*hugo.gallardo@ufsc.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Campus Universitário-Trindade, Florianópolis, SC, Brasil. CEP: 88040-900

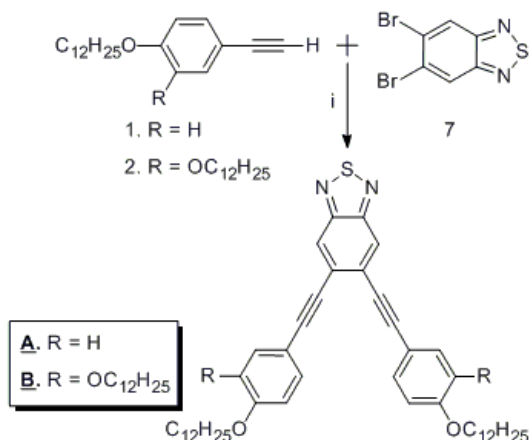
Palavras Chave: Fluorescência, benzotiadiazol, Acoplamento C-C.

### Introdução

Compostos orgânicos fluorescentes apresentam várias vantagens sob materiais inorgânicos, como ambiente amigável, métodos de fabricação de baixo custo e controle de suas propriedades de acordo com sua estrutura química. Eles apresentam variadas aplicações como Nanopartículas Orgânicas Fluorescentes (FONs)<sup>1</sup> e Dispositivos Orgânicos Emissores de Luz (OLEDs)<sup>2</sup>, para uso em dispositivos eletroópticos, sensores moleculares e probes. O heterociclo 2,1,3-benzotiadiazol possui uma estrutura planar e os seus derivados lineares quando conjugados com substituintes nos posições 4 e 7 têm mostrado fluorescência e mesomorphismo.<sup>3</sup> Neste trabalho, apresentamos a síntese e caracterização dos compostos fluorescentes em forma de V derivados do 5,6-dissubstituído 2,1,3-benzotiadiazol (**A**, **B**) e sua comparação das propriedades fotofísicas com propriedades dos seus análogos lineares.

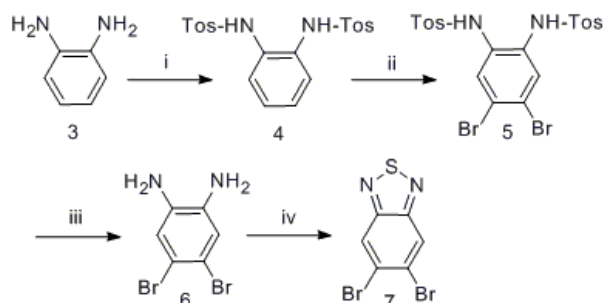
### Resultados e Discussão

Os compostos alvos (**A**, **B**) foram sintetizados por acoplamento cruzado de Sonogashira entre os intermediários **1** e **2** contendo unidades acetileno terminais com o intermediário **7** como mostrado no esquema 1.



**Esquema 1.** Rota sintética dos produtos finais. i) PPh<sub>3</sub>, Et<sub>3</sub>N, CuI, PdCl<sub>2</sub>(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>.

Os intermediários **1** e **2** foram preparados de acordo com a literatura<sup>4</sup>. O intermediário **7** foi preparado conforme esquema 2.



**Esquema 2.** Rota sintética do intermediário **7**. i) TosCl, piridina, refluxo 3h; ii) Br<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>CO<sub>2</sub>Na, CH<sub>3</sub>CO<sub>2</sub>H, 100 °C, 4h; iii) H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O, 120 °C, 3h; iv) SOCl<sub>2</sub>, piridina, refluxo 3h.

Para ambos os compostos finais, espectros de fluorescência e espectros dos absorções UV-Vis foram realizados em clorofórmio.

O espectro de absorção do produto final **A** apresentou duas bandas. Em 285 nm (transições do tipo π-π\*) com coeficiente de absorvidade molar de 50500 LMol<sup>-1</sup>cm<sup>-1</sup> e em 396 nm (transições do tipo n-π\*) com coeficiente de absorvidade molar de 20600 LMol<sup>-1</sup>cm<sup>-1</sup>. Composto **B** apresentou a primeira banda em 298 nm (transições do tipo π-π\*) com coeficiente de absorvidade molar de 36500 Lmol<sup>-1</sup>cm<sup>-1</sup> e a segunda banda em 405 nm com coeficiente de absorvidade molar de 12200 Lmol<sup>-1</sup>cm<sup>-1</sup> referente as transições do tipo n-π\*.

### Conclusões

Todos os compostos intermediários e finais foram caracterizados por análises de IV, RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C. Os compostos finais apresentaram fluorescência, e seus rendimentos quânticos estão sendo calculados.

### Agradecimentos

TWAS, CNPq, Capes, UFSC, INCT/CAT

<sup>1</sup> S. Y. Su; H. H. Lin; C. C. Chang. *J. Mater. Chem.* **2010**, *20*, 8653–8658.

<sup>2</sup> C. H. Chen; W. S. Huang; M. Y. Lai; W. Cheng et al. *Adv. Funct. Mater.* **2009**, *19*, 2661–2670.

<sup>3</sup> A. A. Vieira; R. Cristiano; A. J. Bortoluzzi; H. Gallardo. *J. Mol. Struct.* **2008**, 364–71.

<sup>4</sup> H. Gallardo; R. Cristiano; A. A. Vieira; F. Neves; A. W. Ricardo; R. M. Srivastava. *Synthesis*, **2008**, 605–9.