

Estudo sistemático da influência do grupo metóxi nas propriedades fotofísicas do 2,5-difenil-1,3,4-oxadiazol

Alana Carolina Windisch¹ (PG), Eduard Westphal¹ (PG), Fernando Molin¹ (PQ), Hugo Gallardo¹ (PQ)*.
*Hugo@qmc.ufsc.com

¹Departamento de Química – Universidade Federal de Santa Catarina, 88040-900 Florianópolis, SC.

Palavras Chave: luminescência, heterociclo 1,3,4-oxadiazol, 2,5-difenil-1,3,4-oxadiazol, grupo metóxi, propriedades fotofísicas.

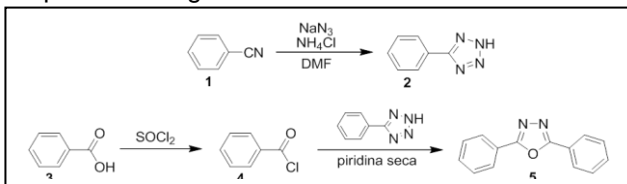
Introdução

Materiais orgânicos contendo em sua estrutura elevada conjugação π são de crescente interesse na área de eletrônica molecular, devido às propriedades intrínsecas de luminescência. Luminescência é a propriedade de um material emitir luz (fótons) ao ser excitado eletronicamente.

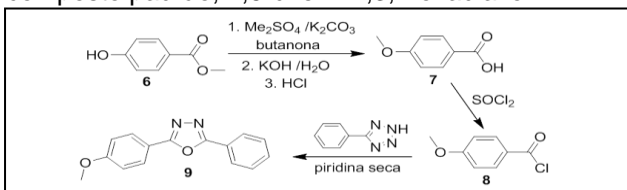
Desde modo, o presente trabalho procura estabelecer uma relação entre o efeito da posição de um grupo metóxi sobre as propriedades fotofísicas de materiais derivados do composto 2,5-difenil-1,3,4-oxadiazol.

Resultados e Discussão

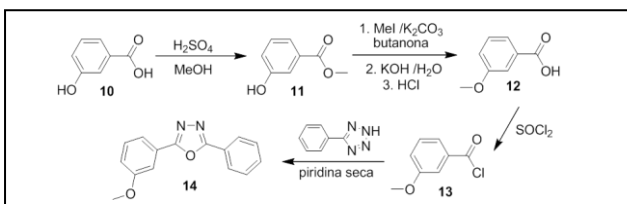
A partir do composto heterociclo 2,5-difenil-1,3,4-oxadiazol uma série de compostos alvo foram planejados de modo a variar-se sistematicamente a posição de um grupo metóxi, na posição orto, meta e para de um anel fenila, afim de entender a relação entre a estrutura molecular e eletrônica, e suas propriedades fotofísicas. As sínteses seguem os esquemas a seguir.



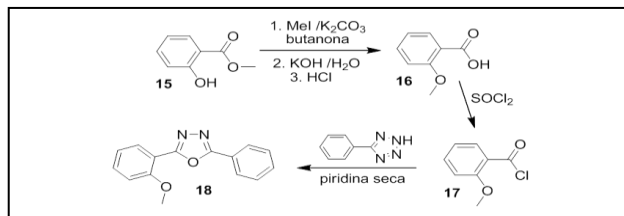
Esquema 1. Síntese do composto 5-feniltetrazol e do composto padrão, 2,5-difenil-1,3,4-oxadiazol.



Esquema 2. Síntese do composto 2-(4-metóxiifenil)-5-fenil-1,3,4-oxadiazol.



Esquema 3. Síntese do composto 2-(3-metóxiifenil)-5-fenil-1,3,4-oxadiazol.



Esquema 4. Síntese do composto 2-(2-metóxiifenil)-5-fenil-1,3,4-oxadiazol.

Todos os compostos finais tiveram suas propriedades fotofísicas investigadas.

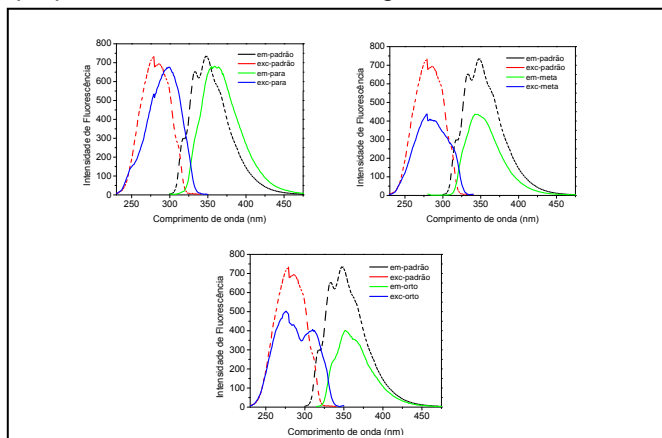


Figura 1. Espectro de excitação do padrão e do composto para, meta e orto-substituído, respectivamente.

Conclusões

Quatro novas moléculas foram sintetizadas com rendimentos satisfatórios e completamente caracterizadas por IV, RMN ¹H e ¹³C, e ponto de fusão. Suas propriedades fotofísicas foram investigadas por espectrofotometria de absorção no UV-vis e emissão.

Todos os compostos finais apresentaram luminescência, sendo bastante perceptível a influência da posição de um grupo metóxi no composto 2,5-difenil-1,3,4-oxadiazol.

Agradecimentos

A UFSC, a CAPES, a PRONEX/FAPESC/CNPq, ao INCT e a SBQ.

¹ Lakowicz, J. R., *Principles of Fluorescence Spectroscopy*. Singapore: Springer, 2, 2006.

² Husain, A.; Ajmal, M.; Synthesis of novel 1,3,4-oxadiazole derivatives and their biological properties. *Acta Pharmaceutica*. 2009, 59(2), 223.