

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

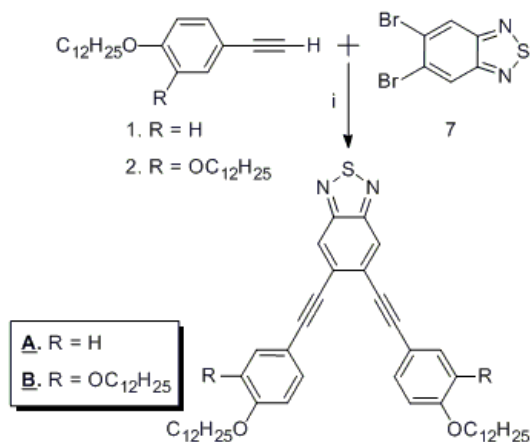
Palavras Chave: Fluorescência, benzotiadiazol, Acoplamento C-C.

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)¹ e Dispositivos Orgânicos Emissores de Luz (OLEDs)², 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 nas posições 4 e 7 têm mostrado fluorescência e mesomorphismo.³ 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

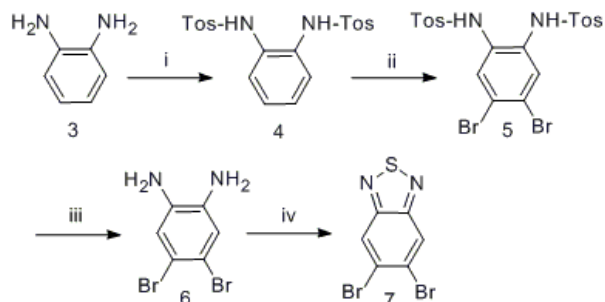
Os compostos alvos (**A**, **B**) foram sintetizados por acoplamento cruzado de Sonogashira entre os intermediários **1** e **2** contendo unidades acetileno terminais com o intermediário **7** como mostrado no esquema 1.



Esquema 1. Rota sintética dos produtos finais. i) PPh₃, Et₃N, CuI, PdCl₂(PPh₃)₂.

Os intermediários **1** e **2** foram preparados de acordo com a literatura⁴.

O intermediário **7** foi preparado conforme esquema 2.



Esquema 2. Rota sintética do intermediário **7**. i) TosCl, piridina, refluxo 3h; ii) Br₂, CH₃CO₂Na, CH₃CO₂H, 100 °C, 4h; iii) H₂SO₄-H₂O, 120 °C, 3h; iv) SOCl₂, 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⁻¹cm⁻¹ e em 396 nm (transições do tipo n-π*) com coeficiente de absorvidade molar de 20600 LMol⁻¹cm⁻¹. Composto **B** apresentou a primeira banda em 298 nm (transições do tipo π-π*) com coeficiente de absorvidade molar de 36500 LMol⁻¹cm⁻¹ e a segunda banda em 405 nm com coeficiente de absorvidade molar de 12200 LMol⁻¹cm⁻¹ referente as transições do tipo n-π*.

Conclusões

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

Agradecimentos

TWAS, CNPq, Capes, UFSC, INCT/CAT, PRONEX-FAPESC

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

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

³ A.A. Vieira; R. Cristiano; A.J. Bortoluzzi; H. Gallardo. *J. Mol. Struct.* **2008**, 364-71.

⁴ H. Gallardo; R. Cristiano; A.A. Vieira; F. Neves; A.W. Ricardo; R.M. Srivastava. *Synthesis*, **2008**, 605-9.