

Síntese e Caracterização de Monômeros Derivados do 2,1,3-benzotiadiazol 4,7-dibromados Contendo Duas Cadeias Alcóxido.

Fernando Molin (PQ)*, Michael B.S. Spano(IC), André L. Krasinski (IC). *fmolin@utfpr.edu.br

Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Departamento de Química e Biologia, Campus Curitiba, sede Ecoville, Curitiba – PR.

Palavras Chave: Células Solares, Semicondutores, Benzotiadiazol.

Introdução

O heterociclo 2,1,3-benzotiadiazol é um dos mais importantes núcleos utilizados na química dos compostos fotoluminescentes e aplicáveis para a tecnologia de conversão de luz. [1]

Semicondutores orgânicos têm sido intensivamente explorados para aplicações eletrônicas nos últimos anos, apresentando discussões na literatura sobre suas vantagens como emissão de diodos luminescentes (OLEDs), transistores de filmes finos orgânicos (OTFTs) e fotovoltaico orgânico (OPVs). [2]

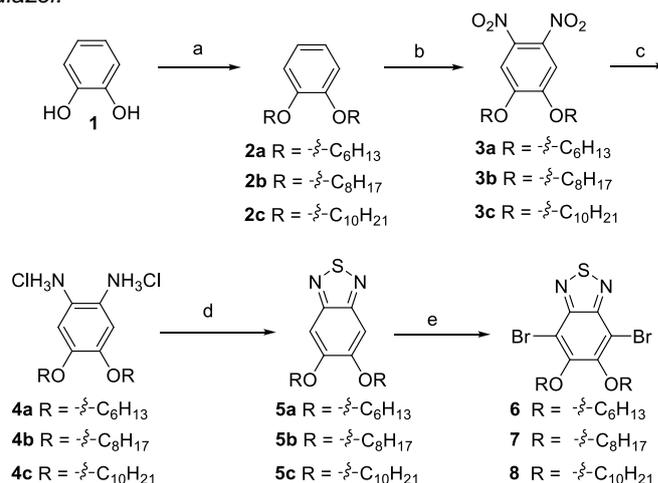
Principalmente no crescente campo das células solares poliméricas, vários tipos de sistemas poliméricos com novas arquiteturas surgiram para melhorar o desempenho e estabilidade química. Existem duas abordagens principais, são elas: por misturas poliméricas e por desenvolvimento de novos materiais doadores-aceptores. [3]

Nesse trabalho será apresentado a síntese de três monômeros derivados do 2,1,3-benzotiadiazol 4,7 dibromado, com estudo na variação do tamanho das cadeias alcóxi, contendo 6, 8 e 10 carbonos.

Resultados e Discussão

A rota sintética utilizada para a obtenção dos compostos finais é mostrada no esquema 1, seguindo a literatura [4].

A síntese dos compostos 5,6-dialcóxi-4,7-dibromo-2,1,3-benzotiadiazol foi realizada a partir da alquilação do catecol comercial utilizando agentes alquilantes variando-se o número de carbonos (6, 8 e 10 carbonos). Os compostos di-alkilados foram purificados por recristalização em etanol. Em seguida, esses compostos foram nitrados nas posições 3 e 8 do sistema aromático para formar os compostos **3a-c**. Estes últimos foram, em etapa única, reduzidos com $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ e, logo em seguida, ciclizados com cloreto de tionila. Essa etapa precisa ser feita rapidamente na sequência devido à baixa estabilidade das aminas. Por fim, os compostos ciclizados foram bromados nas posições 4 e 7, fornecendo os produtos finais **6**, **7** e **8**, contendo 6, 8 e 10 carbonos respectivamente.



Esquema 1: Rota sintética do 2,1,3-benzotiadiazol-4,7-dibromados a) K_2CO_3 , metilacetona, 85°C 48h b) $\text{HNO}_3/\text{H}_2\text{SO}_4$, CH_2Cl_2 c) $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}/\text{EtOH}-\text{HCl}$ d) SOCl_2 , $\text{Et}_3\text{N}/\text{CH}_2\text{Cl}_2$ $50-55^\circ\text{C}$ e) $\text{Br}_2/\text{CH}_2\text{Cl}_2 - \text{AcOH}$.

Conclusões

Foram obtidos três monômeros derivados do 5,6-dialcóxi-4,7-dibromo-2,1,3-benzotiadiazol com bons rendimentos. Todos os intermediários e compostos finais foram caracterizados por IV, RMN – ^1H e RMN – ^{13}C . Os monômeros dibromados sintetizados serão utilizados na síntese de três novos polímeros utilizando fluorenos dibromados como espécies doadoras.

Agradecimentos

Os autores agradecem:

- Universidade Tecnológica Federal do Paraná;
- Universal/CNPq;
- Fundação Araucária.

¹ Eur. J. Org. Chem. 2013, 10.1002/ejoc.201201161

² J. Phys. Chem. B 2012, 116, 13554–13560

³ J. Phys. Chem. A 2012, 116, 3681–3690

⁴ J.dyepig. 2012, 10.1016 06.001