

# Síntese do (*E*)-5'-(4-nitroestiril)-[1,1':3',1''-terfenil]-2'-ol e aplicação como sonda na investigação de polaridade de solventes puros

Rafaela I. Stock<sup>1</sup> (PG), Adriana D. S. Schramm<sup>1</sup> (PG), Renata S. Heying<sup>1</sup> (PG), Adailton J. Bortoluzzi<sup>1</sup> (PQ), Vanderlei G. Machado<sup>1\*</sup> (PQ)

\*vanderlei.machado@ufsc.br

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, UFSC, Florianópolis, SC, 88040-900, Brasil

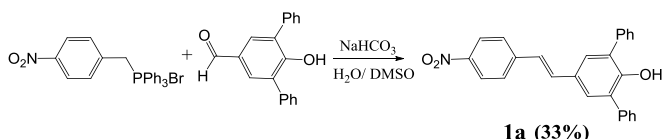
Palavras Chave: corante, solvatocromismo, solvatocromismo reverso.

## Introdução

Os corantes solvatocrômicos possuem capacidade de mudança no espectro de absorção e/ou emissão com a variação da polaridade do meio, o que os habilita como sondas para o estudo de interações soluto-solvente e solvente-solvente.<sup>1</sup> Neste trabalho, o estilbeno (**1a**) foi sintetizado o qual foi desprotonado em meio básico e sua base conjugada (**1b**) foi utilizada como sonda solvatocrômica em 37 diferentes solventes.

## Resultados e Discussão

O composto **1a** foi sintetizado a partir do brometo de (4-nitrobenzil)trifenilfosfônio e 3,5-difenil-4-hidroxibenzaldeído por meio da reação de Wittig (Esquema 1).



Esquema 1. Rota sintética para obtenção de **1a**.

O composto foi caracterizado por ponto de fusão, espectrometria de IV, RMN de <sup>1</sup>H e de <sup>13</sup>C e massa de alta resolução sendo que sua estrutura confirmada por difratometria de raios X (Figura 1).

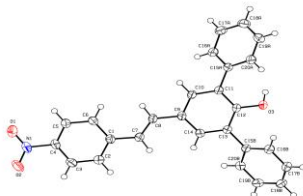


Figura 1. Estrutura molecular do composto **1a**.

O composto **1a** apresenta coloração amarela pálida, porém apresenta várias cores quando é desprotonado (**1b**) como pode ser observado na Figura 2a, indicando que o fenolato resultante é solvatocrômico. A banda solvatocrômica observada no espectro de UV-vis é resultante da transição eletrônica π-π\* do grupo fenolato elétron-doador para o grupo 4-nitrofenil elétron-aceitador.

O gráfico da Figura 2b foi obtido utilizando os valores de  $E_T$  de **1b** em função dos valores de  $E_T(30)$  em 37 solventes.

Os valores de  $E_T$  foram calculados<sup>1,2</sup> utilizando-se os máximos nos comprimentos de onda ( $\lambda_{max}$ ) para as bandas solvatocrômicas do corante.

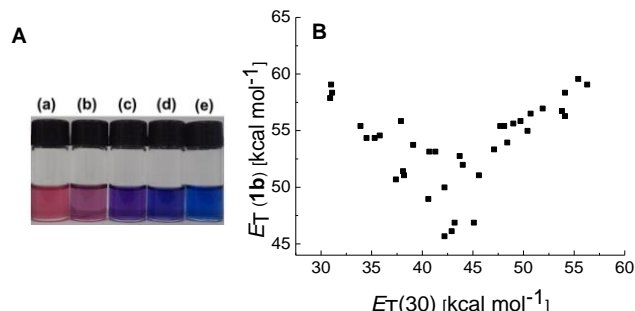


Figura 2. (A) Soluções de **1b** tolueno (a), álcool benzílico (b), acetonitrila (c), acetona (d) e DMF (e). (B) Valores de  $E_T$  do corante **1b** em função dos valores de  $E_T(30)$  em 37 solventes.

O composto **1b** apresenta solvatocromismo reverso:<sup>2</sup> primeiramente, os valores de  $E_T$  do mesmo decrescem do etilenoglicol até a metil-1-pirrolidona-2, ocorrendo um deslocamento hipsocrômico da banda solvatocrômica com o aumento na polaridade do solvente. Posteriormente os valores de  $E_T$  aumentam do ciclohexano até a acetona, ocorrendo um deslocamento batocrômico na banda solvatocrômica com o aumento na polaridade do solvente.

## Conclusões

O composto **1a** foi sintetizado e devidamente caracterizado, comprovando assim a sua estrutura. Quando desprotonado (**1b**) apresenta uma variedade de cores em solução e a análise dos valores de  $E_T$  indica o comportamento característico de solvatocromismo reverso.

## Agradecimentos

À UFSC, Capes e ao CNPq pelo suporte financeiro.

<sup>1</sup> Machado, V.G.; Stock, R.I.; Reichardt, C. *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 10429.

<sup>2</sup> Nandi, L.G.; et al. *J. Org. Chem.* **2012**, *77*, 10668.