

## Novo Derivado do Núcleo Tristriazolotriazina Contendo Enxofre

**Luis Augusto S. e Bega (PG), André L. Krasinski (IC), Fernando Molin (PQ)\* \*fmolin@utfpr.edu.br**

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

Palavras Chave: *Tristriazolotriazina, Luminescente, Enxofre.*

### Abstract

New Derivative of Tristriazolotriazine Core Containing Sulfur.

A new derivative of tristriazolotriazine core containing sulfur was synthesized as a model for novel luminescent compounds.

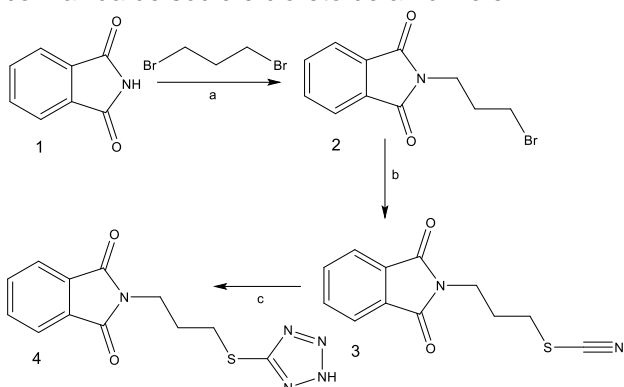
### Introdução

O núcleo rígido tristriazolotriazina (TTT) tem se mostrado interessante no design de novas moléculas com propriedades luminescentes, líquido cristalinas discóticas, ou de formar filmes finos, sendo a síntese de seus derivados ainda pouco explorada até o momento.

Nenhum derivado do núcleo TTT contendo enxofre foi previamente relatado na literatura, impulsionando interesses na sua preparação e observação da influência de um calcogênio em suas propriedades térmicas e fotofísicas. Com esse trabalho espera-se a possibilidade do enxofre, sendo um átomo grande e bastante polarizável, conferir e/ou reforçar novas propriedades luminescentes e de organização supramolecular nas novas moléculas obtidas.

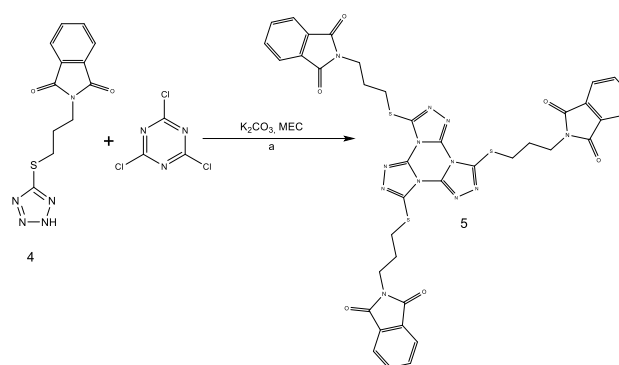
### Resultados e Discussão

O esquema 1 apresenta a rota sintética para obtenção do composto 4. Partiu-se da fatalimida, a qual foi submetida a uma alquilação com 1,3-dibromopropano, seguido de uma substituição do segundo bromo por tiocianato e finalmente a obtenção do tiotetrazol 4 através da reação clássica com azida de sódio e cloreto de amônio em DMF.



**Esquema 1.** Rota sintética para obtenção do tiotetrazol 4. a)  $K_2CO_3$ , MEC; b)  $KSCN$ , EtOH; c)  $NH_4Cl$ ,  $NaN_3$ , DMF.

O composto final 5 foi preparado reagindo-se o tiotetrazol 4 com cloreto cianúrico em MEC seca e carbonato de potássio como base, conforme ilustrado no esquema 2.



**Esquema 2.** Rota sintética para obtenção do composto 5, TTT contendo enxofre. a)  $K_2CO_3$ , MEC.

### Conclusões

Os compostos inéditos 4 e 5 foram obtidos com sucesso, tendo suas estruturas confirmadas por RMN –  $^1H$ , RMN –  $^{13}C$  e espectrometria de massas de alta resolução. O composto final 5 foi o primeiro derivado do núcleo TTT contendo enxofre ligado diretamente ao núcleo conjugado, assim como o primeiro a conter enxofre em sua estrutura total e apresenta-se bastante luminescente. Novas moléculas estão sendo preparadas e caracterizadas esperando-se obter estruturas automontadas com propriedades líquido cristalinas.

### Agradecimentos

Os autores agradecem:

- Universidade Tecnológica Federal do Paraná;
- Universal/CNPq;
- Centro de RMN da Universidade Federal do Paraná.

<sup>1</sup> Langmuir 2012 28 (31), 11590-11598.

<sup>2</sup> Chem. Commun., 2008, 5134-5136.

<sup>3</sup> Dissertação de Mestrado. Alana Carolina Windisch 2014.