

## Sobre a síntese de novos “viologens” piridínicos com o núcleo 2,1,3-benzotiadiazola

Fabiana S. Mancilha (PG) Brenno Amaro DaSilveira Neto (PG), Jaírton Dupont (PQ)

*IQ-UFRGS, CP 15003, CEP 91501-970, Porto Alegre - RS – Brasil e-mail: brenno.ipi@gmail.com*

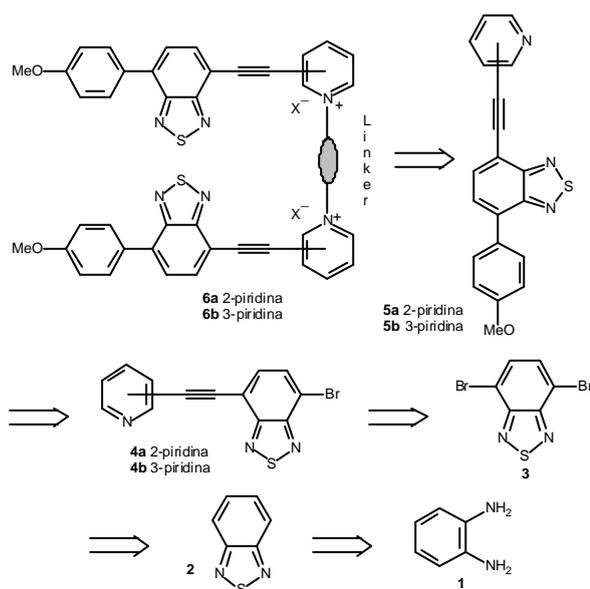
*Palavras Chave: Luminescentes, OLEDs, benzotiadiazolas.*

### Introdução

“Viologens” são moléculas aceptoras de carga multipositivas (normalmente bicarregadas). Tais moléculas são extremamente usadas como receptores de cargas (em especial elétrons) em reações fotoquímicas. Isso possibilita a sua utilização como compostos dopantes em tecnologia de diodos orgânicos emissores de luz (OLEDs).<sup>1</sup> O núcleo 2,1,3-benzotiadiazola (BTD) também possui inúmeras características desejáveis para a tecnologia de OLEDs como alta estabilidade térmica e fotoquímica.<sup>2</sup> A combinação do núcleo BTD com piridinas possibilitaria a combinação ideal para a síntese de novos análogos “viologens” com potencial na aplicação de OLEDs.

### Resultados e Discussão

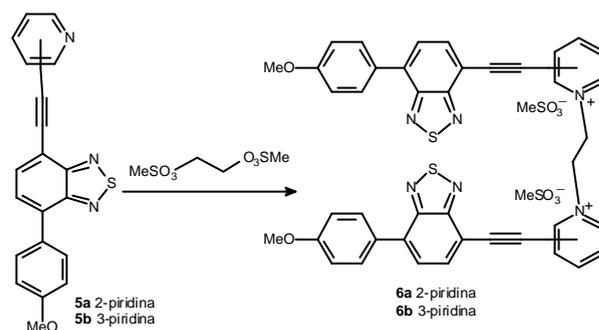
A proposta para a síntese dos novos precursores fotoluminescentes “viologens” podem ser vista no Esquema 1.



**Esquema 1.** Análise retrossintética para a obtenção dos análogos “viologens” **6a-b**.

A síntese inicia-se com a formação da BTD **2** a partir da reação entre a *o*-fenilendiamina comercial **1** com  $\text{SOCl}_2$  em um rendimento de 93% após purificação  
29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

por arraste à vapor. A reação do composto **2** com  $\text{Br}_2$  em  $\text{HBr}$  leva à obtenção do sistema BTD dibromado em 95% de rendimento após purificação. A obtenção da BTD fotoluminescente **4a-b** é realizada através de um acoplamento Sonogashira em um rendimento de 93% e 82% para os derivados da 2piridina e da 3 piridina, respectivamente, após purificação cromatográfica. O acoplamento Suzuki é promovido com um paladacilo específico em um rendimento de 95% após purificação por coluna cromatográfica. Os novos compostos foram caracterizados por espectroscopia de  $^1\text{H}$  RMN,  $^{13}\text{C}$  RMN e IV. Como perspectiva tem-se a formação dos novos sistemas “viologens” (Esquema 2).



**Esquema 2.** Sobre a síntese dos novos “viologens” **6a-b**.

### Conclusões

Uma nova molécula fotoluminescente com conjugação  $\pi$ -estendida contendo o núcleo BTD e nitrogênio piridínico, precursora de um novo sistema “viologen” foi sintetizada em excelentes rendimentos. A formação dos novos aceptores de carga fotoluminescentes “viologens” está em andamento neste laboratório.

### Agradecimentos

Os autores agradecem a CAPES, CNPq e Petrobrás pelo suporte financeiro e bolsas concedidas.

<sup>1</sup> Park, J. W.; Lee, S. Y.; Song H. J.; Park, K. K. *J. Org. Chem.* **2005**, *70*, 9505-9513.

<sup>2</sup> DaSilveira Neto, B. A.; Lopes, A.S.; Ebeling, G.; Gonçalves, R. S.; Costa, V. E. U.; Quina, F. H.; Dupont, J. *Tetrahedron* **2005**, *61*, 10975-10982.