

Síntese e caracterização de materiais discóticos derivados da 1,3,5-triazina para aplicações em dispositivos eletrônicos moleculares

Rodrigo Cristiano (PG), Hugo Gallardo* (PQ) hugo@qmc.ufsc.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina-UFSC, Campus Trindade, Florianópolis-SC, 88040900.

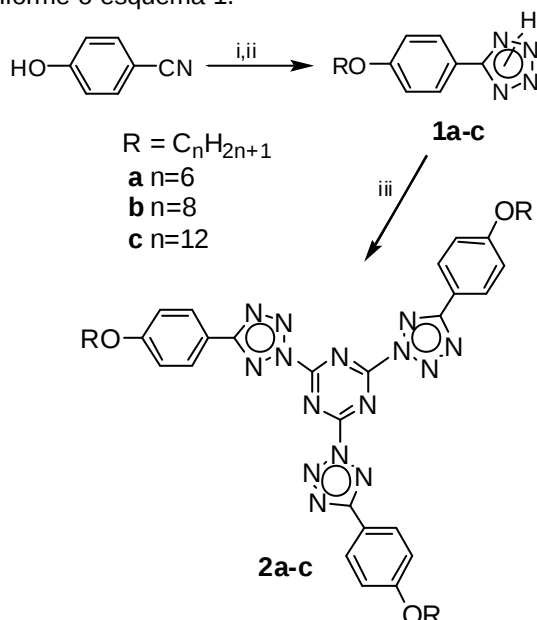
Palavras Chave: eletrônica molecular, tetrazol, triazina.

Introdução

Materiais funcionais contendo heterociclos deficientes de elétrons, tais como oxadiazol e triazina são de atual interesse na área de dispositivos eletrônicos moleculares¹. Moléculas discóticas com unidade central contendo tais heterociclos, e longas cadeias alifáticas terminais podem sofrer processos de automontagem formando superestruturas colunares (como nanofios), onde a mobilidade de carga é bastante elevada no centro e isolante na parte periférica alifática². Nesse contexto, nosso interesse está focado no desenho, síntese e caracterização de materiais moleculares discóticos contendo heterociclos 1,3,5-triazina e tetrazol.

Resultados e Discussão

Os compostos finais **2a-c** foram projetados com um centro elétron-deficiente (triazina) ligado no N-2 do anel tetrazol rico em elétrons. Foram preparados conforme o esquema 1.



Condições: i) RBr, K₂CO₃, butanona refluxo 24h (92%); ii) NaN₃, NH₄Cl, DMF 110°C 12h (90%), iii) cloreto cianúrico, K₂CO₃, butanona refluxo 40h (76%).

Esquema 1. Rota sintética para as moléculas-alvo **2a-c**.

A série de 2,4,6-tris-[5-(4-alcóxifenil)tetrazol-2-il]-[1,3,5]-triazina **2a-c** foi sintetizada a partir do 4-cianofenol pela sequência de O-alkilação, formação do anel tetrazol (cicloadição), seguida pela reação de ataque nucleofílico do tetrazol sobre o cloreto cianúrico (apenas produto de ataque N-2). Os compostos foram caracterizados por IV, RMN de ¹H e ¹³C e por análise elementar. Suas propriedades térmicas foram avaliadas por microscopia óptica de luz polarizada (MOLP), DSC e TGA e seu perfil fotofísico por UV-vis e fluorimetria (tabela 1).

Apesar da anisotropia geométrica, **2a-c** não são cristais líquidos. Contudo, no resfriamento, após a fusão para o líquido isotrópico desses materiais, não há cristalização formando filme transparente que não volta a cristalizar. Composto **2a** mostra transição vítrea a 61 °C no segundo aquecimento da amostra a partir da temperatura ambiente. Os materiais exibem intensa banda de absorção em solução com pico máximo a 295 nm e fraca fluorescência azul que decai com o tempo (fotodegradação).

Tabela 1. Perfil térmico e fotofísico de **2a-c**.

Comp.	Transições (°C) ^a	T _{dec.} ^b	λ _{abs} ^c	λ _{em} ^c
2a	Cr 129,7 I	491	295	408
2b	Cr ₁ 69,7 Cr ₂ 93,8 I	488	295	408
2c	Cr 86,6 I	453	295	408

^a por MOLP e DSC 10°C/min (Cr-Cristal; I- Líq. Isotrópico); ^b decomposição (°C) por TGA; ^c em solução CHCl₃ (unidade: nm).

Conclusões

Uma série de compostos discóticos derivados da 1,3,5-triazina **2a-c** foi sintetizada e caracterizada. Tais compostos não apresentaram fases líquido-cristalinas, contudo exibem um estado super-resfriado, sendo capazes de formar filmes transparentes, bastante interessantes para aplicações em dispositivos eletrônicos moleculares.

Agradecimentos

CNPq, FUNCITEC, PRONEX e UFSC

¹ Aldred, M.P.; Vlachos, P.; Dong, D.; Kitney, S.P.; Tsoi, W.C.; O'Neill, M. e Kelly, S.M. *Liq. Cryst.* **2005**, 32, 951.

² Cristiano, R., Santos, D.M.P.O., Gallardo, H. *Liq. Cryst.* **2005**, 32, 7.