

Acoplamento Sonogashira aplicado a síntese de cristais líquidos luminescentes derivados dos 1,2,4-oxadiazóis.

Hugo Gallardo (PQ),^a André A. Vieira (PG),^a Gilmar Conte (PG),^a Rodrigo Cristiano (PG),^a Ricardo A.W. Neves Filho (PG),^b Rajendra M. Srivastava (PQ).^{*b}

^a Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC – 88040-900, Brazil.

^b Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE – 50740540, Brazil.

Fax: +55(48)37216850

E-mail: hugo@gmc.ufsc.br

Palavras Chave: 1,2,4-oxadiazol, Sonogashira, Cristais líquidos, luminescência.

Introdução

Cristais líquidos (CLs) contendo alta conjugação π e anéis heterociclos tem atraído grande interesse no campo dos diodos orgânicos emissores de luz (OLEDs). A presença de anéis heteroaromáticos deficientes em elétrons é altamente desejável, pois podem levar a um bom transporte de carga.¹ A junção dessa habilidade e a auto-organização inerente aos compostos líquido cristalinos aliadas a forte fluorescência faz desses materiais fortes candidatos para aplicações em OLEDs. Nosso grupo de pesquisa tem relatado o uso do acoplamento Sonogashira na síntese de vários cristais líquidos luminescentes contendo o anel 1,3,4-oxadiazol. Aqui relatamos a síntese de uma nova série de CLs derivados do 1,2,4-oxadiazol e os resultados preliminares sobre suas propriedades ópticas e líquido cristalinas.

Resultados e Discussão

Os intermediários **1** e **2** foram preparados seguindo procedimentos relatados na literatura.² Para obter os compostos **3a-e** foi realizado o acoplamento catalisado por paládio entre os aril acetilenos **1a-e** e o intermediário **2**. (Figura 1)

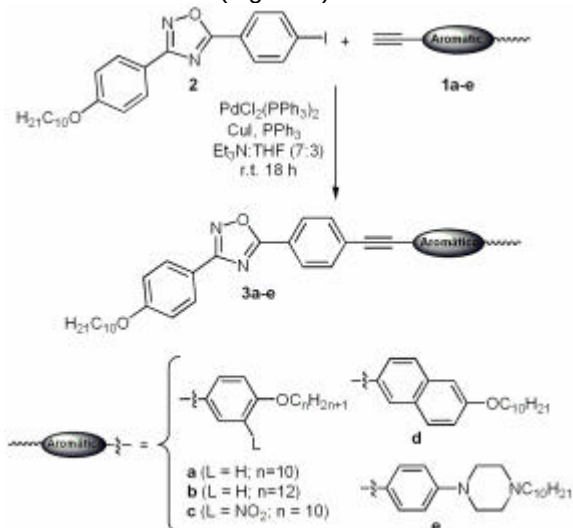


Figura 1. Síntese dos compostos **3a-e**.

Utilizando 10 mol% de $\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$, 10 mol% de PPh_3 e 5 mol% de CuI como sistema catalítico em $\text{Et}_3\text{N}:\text{THF}$ (7:3) a temperatura ambiente. Os compostos desejados foram obtidos em bons rendimentos após cristalização em diclorometano e hexano. Os compostos **3a-e** foram caracterizados por espectrometria de IV, RMN de ^1H e ^{13}C e análise elemental de CHN.

As mesofases observadas para estes compostos foram N, SmC e SmA, típicas de cristais líquidos calamíticos. Os compostos finais **3a-e** exibiram absorção entre 321-349nm, e emissão entre 390-468nm. Os dados estão reunidos na tabela abaixo.

Tabela 1.

Comp.	Rend. (%)	$\lambda_{\text{abs.}}$ (nm)	$\lambda_{\text{em.}}$ (nm)	Temp. de transição (°C)
3a	81	333	413	Cr 104 SmC 169 N 195 I
3b	82	333	412	Cr 105 SmC 162 N 184 I
3c	74	321	390	Cr 86 SmC 149 SmA 158 I
3d	80	346	437	Cr 102 SmC 190 N 228 I
3e	77	349	468	Cr 124 SmC 171 SmA 256 I ^a

a Início de decomposição

Conclusões

Foi sintetizada uma nova série de cristais líquidos contendo o anel 1,2,4-oxadiazol, através da reação de acoplamento cruzado de Sonogashira. Todas as moléculas finais apresentaram estado líquido cristalino e bons rendimentos.

Agradecimentos

CNPq, UFSC, UFPE.

¹ Vlachos, P.; Mansoor, B.; Aldred, M. P.; O'Neill, M.; Kelly, S. M. *Chem. Commun.*, **2005**, 2921.

² a) Cristiano, R.; Vieira, A. A.; Ely, F.; Gallardo, H. *Liq. Cryst.*, **2006**, 381-390. b) Cristiano, R.; Santos, D. M. P. O.; Gallardo, H. *Liq. Cryst.*, **2005**, 7-14.