Síntese de Compostos Luminescentes, derivados do 1,3,4-oxadiazol com simetria-C_3

Tiago Frizon(PG), Antonio Luiz Braga (PQ), Hugo Gallardo (PQ)* *hugo@qmc.ufsc.br*

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, 88040-900 Florianópolis, SC.

Palavras Chave: *OLEDs, 1,3,4-oxadiazol, supramolecular*

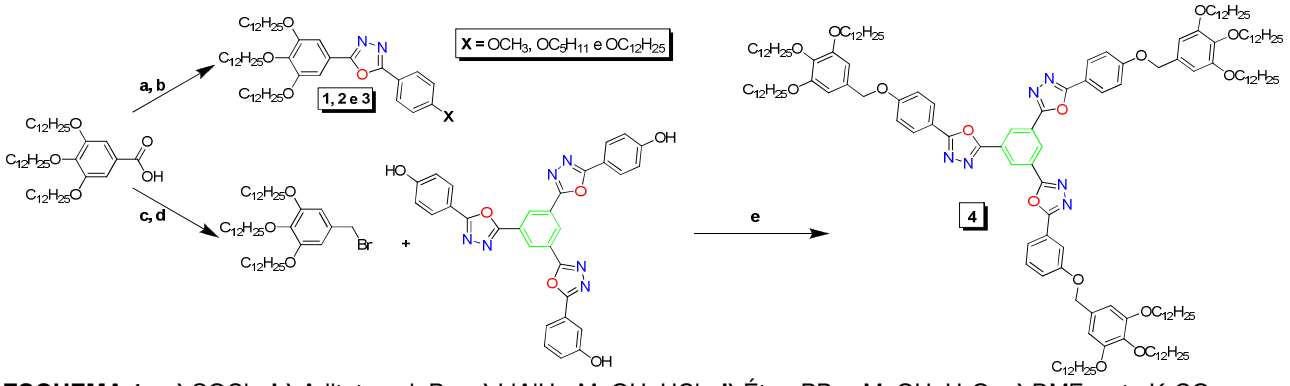
Introdução

Inúmeras pesquisas têm sido dedicadas nos últimos anos para o desenho e síntese de materiais orgânicos, quer sejam poliméricos ou moleculares, com propriedades eletroluminescentes. OLEDs (*organic light emitting diodes) são* hoje uma grande área de pesquisa, envolvendo interesse acadêmico assim como tecnológico, com grande potencial de aplicação na indústria eletro-eletrônica, como *displays* de elevado brilho e flexibilidade[1].

Neste trabalho são apresentados novos compostos contendo o heterociclo 1,3,4-oxadiazol, derivados do ácido gálico, o qual possui grande interesse na química supramolecular.

Resultados e Discussão

A síntese dos derivados do oxadiazol foi realizada de acordo com o esquema 1.



ESQUEMA 1. a) $SOCl_2$; **b)** Ariltetrazol, Py. **c)** $LiAlH_4$, MeOH, HCl; **d)** Éter, PBr_3, MeOH, H_2O; **c)** DMF, cat., K_2CO_3.

Análise do comportamento térmico

As propriedades térmicas foram investigadas por Calorimetria Diferencial de Varredura; Análise Termogravimétrica e Microscopia Óptica de Luz Polarizada listadas na tabela 1. Somente o composto **4** apresenta comportamento líquido cristalino, caracterizado por SAX como uma mesofase colunar cúbica. As observações ópticas confirmam esta mesofase e mostram uma mesofase pseudo-isotrópica com baixa birrefringência. No resfriamento não volta ao estado sólido, e se mantém no estado mesomórfico.

Tabela 1. Temperaturas de transição (^{0}C) e temperaturas de decomposição (^{0}C) dos compostos **1, 2, 3 e 4.**

Compostos	Transições de fase[a]	T_d[b]
1	Cr 69 I I 45 Cr	446,7
2	Cr 54 I I 36,5 Cr	466,2
3	Cr 57 I I 38 Cr	475,8
4	Cr 117 I I 99 - baixa birrefringência	449,8

[a] Transição detectada por DSC e microscopia óptica (10^0Cmin^{-1}).
[b] Medias Termogravimétricas, início da decomposição sobre nitrogênio (10^0Cmin^{-1}).

Tabela 2. Medidas ópticas dos compostos **1, 2, 3 e 4.**

Composto	Absorção	Emissão[b]		
	$\lambda_{abs\ max}$/nm	$\lambda_{em\ max}$/nm	*Desloc. Stokes /nm*	Φ_{PL}[c]
1	307,2	376,4	69,2	0.700
2	307,2	376,4	69,2	0.750
3	307,2	376,4	69,2	0.720
4	315	378	63	0.120

[a]Solvente em $CHCl_3$. [b] $\lambda_{exc.}$=320nm. [c] Padrão PBD (Φ_f = 1).

Conclusões

Esta nova classe de compostos com simetria C_3, apresenta uma forte luminescência azul, e mesomorfismo discótico hexagonal cúbico. Estes compostos apresentaram uma boa estabilidade térmica com temperatura de decomposição em torno de 400 °C, adequados para aplicações em dispositivos eletrônicos.

Agradecimentos

1 .Weder C.; Sarwa, C.; Montali, A.; Bastiaansen, G.; Smith, P. *Science* 1998, 279, 835-837.
2 .Lehn, J.M., *Science* 2002, 295, 2400-2403.
3. Cristiano R; Gallardo H; Bortoluzzi A; Bechtold I; Campos C; Longo R. Chem. Commun., 2008, 5134–5136.