

Compostos fotoluminescentes contendo o heterociclo 1,3,4-oxadiazol: síntese e estudo de suas propriedades ópticas e térmicas

Marli Ferreira (PG)^{a*}, André A. Vieira (PG)^a, Eduard Westphal (PG)^a, Juliana Eccher (PG)^b, Mariana Victória Ballottin (IC)^b, Ivan Helmuth Bechtold (PQ)^b, Hugo Gallardo (PQ)^a. marliff@hotmail.com

^aDepartamento de Química, ^bDepartamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina-UFSC, 88040-900 Florianópolis, SC, Brasil.

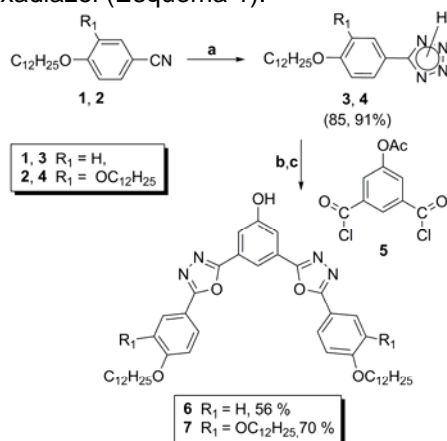
Palavras Chave: *materiais luminescentes, 1,3,4-oxadiazol.*

Introdução

Cada vez mais o mercado está exigindo materiais funcionais, destacando-se os materiais de elevada capacidade de transporte de elétrons, para a fabricação de dispositivos eletro-ópticos com uma maior eficiência. Materiais transportadores de elétrons, geralmente são moléculas contendo N-heterociclos deficientes de elétrons π , como oxadiazóis, triazóis, piridinas, quinolinas, etc., podem efetivamente melhorar a afinidade eletrônica. Dentre estes heterociclos, oxadiazol é um dos mais utilizados em OLEDs.^{1,2} Neste trabalho é descrito a síntese e estudo referente a estrutura molecular e as propriedades ópticas, térmicas e mesomórficas de novos materiais contendo o heterociclo 1,3,4-oxadiazol.

Resultados e Discussão

Para a síntese dos compostos alvos (**6** e **7**), primeiramente foi feito a reação de cicloadição 1,3-dipolar entre as nitrilas **1** e **2** com NH_4N_3 (formado *in situ*, a partir da NaN_3 e NH_4Cl), fornece os respectivos tetrazóis **3**, **4**. Estes intermediários foram reagidos com o dicloreto de ácido **5**, recém preparado, refluxando em piridina por 24 h. Em seguida foi feito a reação de desproteção da hidroxila com NaOH_{aq} (*in situ*), resultando nos compostos finais (**6** e **7**) contendo o heterociclo 1,3,4-oxadiazol (Esquema 1).



Esquema 1. a) NaN_3 , NH_4Cl , DMF; b) **5**, piridina e refluxo 24 h; c) NaOH_{aq} , 4 h.

Os oxadiazóis finais **6** e **7** e seus intermediários foram caracterizados por espectrometria de IV e RMN de ^1H e ^{13}C . As propriedades térmicas dos materiais preparados foram investigadas por microscopia óptica de luz polarizada (MOLP), calorimetria diferencial de varredura (DSC) e análise termogravimétrica (TGA). Os compostos finais, **6** e **7** apresentaram texturas características líquido-cristalinas quando observados por MOLP, as quais foram confirmadas por DSC e caracterizadas por difração de raio-X (XRD) como fase Col_h com largas faixas de fase líquido-cristalina. Além disso, os materiais apresentaram ótima estabilidade térmica, com temperaturas de decomposição acima de 400 °C (valores obtidos por TGA).

Foram realizadas análises de espectroscopia de absorção e emissão em solução e também em filme. Nos espectros de UV-vis dos compostos (**6** e **7**) em solução de CHCl_3 , observou-se os máximos de absorção entre 396 e 454 nm, e os comprimentos de onda de emissão máxima em 423 e 446 nm. Os 1,3,4-oxadiazóis (**6** e **7**) são bons fluoróforos, com rendimentos quânticos de fluorescência (Φ_F) de 64 e 42 % (respectivamente).

Conclusões

Dois novos compostos finais contendo o heterociclo 1,3,4-oxadiazol foram sintetizados com rendimentos satisfatórios. Ambos possuem fase líquido-cristalina, apresentando largas faixas de fase Col_h (~70 °C), excelente estabilidade térmica, além disso, apresentaram bons resultados de rendimento quântico, sendo assim, possíveis candidatos para aplicações optoeletrônicas.

Agradecimentos

UFSC, CNPq, SBQ, FAPESC e INCT catálise.

¹Zhang, X.; Tang, B.; Zhang, P.; Li, M.; Tian, W, *J. Mol. Struct.* **2007**, *846*, 55.

²Aldred, M. P.; Vlachos, P.; Dong, D.; Kitney, S. P.; Tsoi, W. C.; O'Neill, M.; Kelly, S. M. *Liq. Cryst.* **2005**, *32*, 951.