

INVESTIGAÇÃO DAS PROPRIEDADES LÍQUIDO-CRISTALINAS EM SISTEMAS 4,7-DIFENILETINIL-2,1,3-BENZOTIADIAZOL

Leonardo de O. Aguiar¹ (IC), Hugo Oliveira¹ (IC), Elias Regis¹ (PG), Patricia Tuzimoto² (PQ), Hugo Gallardo³ (PQ), André A. Vieira¹ (PQ)*. E-mail: vieira.andre@ufba.br

¹Grupo de Pesquisa em Síntese Química - GPSQ, Instituto de Química, Depto. de Química Orgânica, Universidade Federal da Bahia, 40170-115, Salvador, BA. ²Instituto Federal do Paraná, Campus Pinhais, 83330-200, Pinhais, PR.

³Laboratório de Síntese de Cristais Líquidos, Depto. de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, 88040-900, Florianópolis, SC.

Palavras Chave: Cristais Líquidos, heterociclo, 2,1,3-benzotiadiazol.

Abstract

The present work aims to study the liquid-crystalline properties in 4,7-diphenylethynyl-2,1,3-benzothiadiazole systems, fully characterizing the molecules and their thermal/photophysical properties.

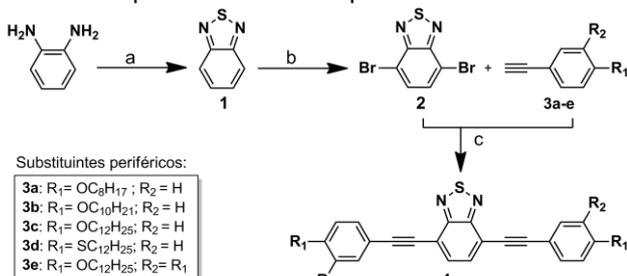
Introdução

Os cristais líquidos (CLs) termotrópicos são conhecidos por sua capacidade de auto-organização em função da temperatura. Esse tipo de material vem sendo sintetizado usando diversos sistemas heterocíclicos, combinando as propriedades intrínsecas dos heterociclos com a organização molecular dos CLs.

Este trabalho tem como objetivo investigar os tipos de mesofases que podem ser obtidas a partir da variação de grupos periféricos no sistema 4,7-difeniletinil-2,1,3-benzotiadiazol e estudar o impacto sobre as suas propriedades fotofísicas.

Resultados e Discussão

A rota sintética teve início na preparação do heterociclo 2,1,3-benzotiadiazol a partir da *o*-fenilenodiamina e cloreto de tionila. O composto **1** foi funcionalizado com Br₂ e HBr. Na sequência a molécula **2** foi utilizada para realizar reações de *Sonogashira* com diferentes alcinos terminais (**3a-e**). Os alcinos utilizados apresentam cadeias alcóxi e sulfóxi de diferentes comprimentos (8, 10 e 12 carbonos). A **Figura 1** apresenta as reações realizadas para obter os compostos finais **4a-e**.



Reagentes e condições: (a) SOCl₂, TEA, CH₂Cl₂ (84%); (b) Br₂, HBr/H₂O (75%); (c) PdCl₂(PPh₃)₂, CuI, TPP, TEA/THF.

Figura 1. Rota sintética para moléculas **4a-e**.

Os compostos desejados foram obtidos com ótimos rendimentos. As moléculas **4a-e** foram caracterizadas por espectroscopia de IV, RMN de ¹H e ¹³C e espectrometria de massas (TOF-APPI).

Depois de sintetizados e caracterizados, os compostos finais foram estudados por DSC, TGA e MOLP. Os dados obtidos revelam que todos os compostos apresentam alta estabilidade térmica com temperaturas de decomposição acima de 355°C. Além disso, com exceção de **4e**, todas as moléculas apresentaram mesomorfismo calamítico, exibindo fases nemáticas e esméticas. As propriedades fotofísicas também foram determinadas. A absorção máxima para os compostos finais variou entre 438 e 446nm e a emissão ficou entre 520 e 522nm. Os dados estão resumidos na **Tabela 1**.

Tabela 1. Propriedades térmicas e fotofísicas (**4a-e**).

Comp.	Rend. (%)	λ _{abs.} (nm)	λ _{em.} (nm)	Temp. de transição (°C) ^a
4a	62,2	438	521	Cr 133 N 175 I
4b	75,5	440	520	Cr 114 SmC ^b 130 N 157 I
4c	74,7	438	522	Cr 113 SmC 142 N 151 I
4d	47,2	440	521	Cr 110 N ^b 116 I
4e	56,5	446	522	Cr 119 I

Cr = Cristal; N = fase nemática; SmC = fase esmética C; I = Isotrópico. ^aTemp. de resfriamento, ^bMesofases monotrópicas.

Conclusões

Uma série de moléculas derivadas do heterociclo 2,1,3-benzotiadiazol foi sintetizada e caracterizada. Os compostos finais apresentaram mesofases típicas de CLs calamíticos (exceção **4e**) e forte luminescência.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, FAPESB, UFBA e UFSC.

¹Wang, Y. *J. Mat. Chem.*, **2015**, 3, 7993; ²Behramand, B. et al, *Dyes and Pigments*. **2012**, 95,600; ³Vieira, A. A. et al, *J. Mol. Structure*. **2008**, 875, 364.