

Síntese de díade utilizando um derivado do fluoreno modificado por grupos nitrilas como aceitador de elétrons

Tiago B. Becher^{1*} (PG); Karine C. C. W. S. Klider¹ (PG); Fabio S. dos Santos¹ (PG); Jarem R. Garcia¹ (PQ). *tiago_bbranco@hotmail.com*

¹ Departamento de Química, Universidade Estadual de Ponta Grossa, UEPG, PR, Brasil

Palavras Chave: díade, dispositivo fotovoltaico, fluoreno

Introdução

Uma alternativa para melhorar a eficiência de dispositivos fotovoltaicos orgânicos é a utilização de materiais que produzem estados excitados com cargas separadas com tempo de vida mais longo, diminuindo a perda de energia por recombinação de carga. Deste modo, díades têm sido amplamente estudadas com este objetivo.^{1,2}

Este trabalho apresenta a síntese de uma díade (Figura 1), um composto contendo, simultaneamente, um grupo doador e um aceitador de elétrons unidos por meio de um grupo ponte. O grupo doador escolhido foi o 1,8-naftalimida conectado por uma ponte alifática ao grupo aceitador de elétrons, um derivado do fluoreno, no qual foram adicionados grupos π - aceptores de elétrons na sua estrutura, os cianos.

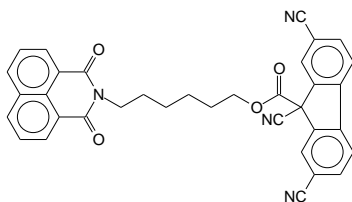


Figura 1: Esquema da díade proposta.

Resultados e Discussão

Em nosso trabalho, inicialmente ocorreu a adição dos iodios ao anel aromático do derivado de fluoreno. Na segunda reação foi realizada a adição das nitrilas, conforme demonstra o esquema a seguir:

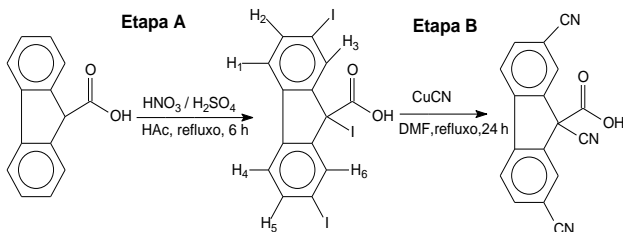


Figura 2: Etapa A: adição dos iodios e Etapa B: adição das nitrilas ao derivado do fluoreno.

Após a realização da síntese os produtos foram caracterizados por espectroscopia de RMN e IV.

Tabela 1: Principais atribuições de RMN ¹H (CDCl₃, 400 MHz) da Etapa A.

	Multiplicidade	δ (ppm)	J (Hz)
H ₁	d	7,417	7,85
H ₂	dd	7,940	7,84 e 1,49
H ₃	d	8,069	1,31
H ₄	d	7,700	8,14
H ₅	dd	8,427	8,14 e 2,10
H ₆	d	8,459	1,97

Analisando os dados do RMN observa-se que as suas constantes de acoplamento sugerem que os iodios se encontram nas posições indicadas na Figura 2.

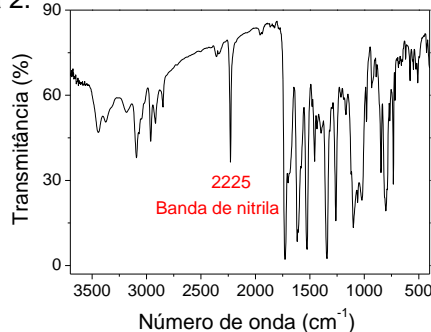


Figura 3: Espectro de IV da Etapa B.

No espectro de IV observa-se a banda característica de nitrila na região de 2225 cm⁻¹, confirmando a entrada deste grupo no composto.

Conclusões

Os resultados demonstrados até o momento comprovam a obtenção das estruturas dos compostos propostos. Todos os produtos foram identificados por Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear de ¹H, de Infravermelho e por meio de medidas de ponto de fusão, exceto os espectros de RMN da etapa B, que ainda estão em fase de desenvolvimento.

Agradecimentos

Os autores agradecem à CAPES, ao CNPq, à Fundação Araucária e à UEPG pelo apoio financeiro

¹ Bhattacharya, S.; Chowdhury, J.; Ganguly, T.; *J. Luminescence* **2010**,130,1924–1934

² Gan, J. et al; *Journal of Organometallic Chemistry* **2002**,645,168–175