

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Projeto de Iniciação Científica Voluntária

***Engenharia de Cristais na manipulação de  
propriedades óticas de uma molécula poliaromática***

Orientador: Prof. Dr. Willian Xerxes Coelho Oliveira

Orientado: Rafael Meireles Missiaggia - 2019103588

Belo Horizonte, Dezembro de 2022

## Introdução e Justificativa

A Engenharia de Cristais é uma área que propõe entender e utilizar as interações intermoleculares no processo de nucleação e nos sólidos para manipular as propriedades de interesse. Dentre propriedades importantes de se avaliar estão as propriedades ópticas, como luminescência e eletroluminescência, pois estas são diretamente afetadas pelas interações intramoleculares (especialmente Ligações de Hidrogênio) e pelas intermoleculares (notoriamente o Empilhamento das ligações  $\pi$ ).<sup>1</sup> Assim sendo, é necessário a busca ativa de polimorfos de moléculas fluorescentes candidatas a sensibilizantes em dispositivos OLEDs, uma vez que se deseja cor uniforme, que pode ser afetado com produção de polimorfos durante o processo de cristalização dos filmes finos.

### *Objetivos gerais*

Sintetizar uma molécula poliaromática com propriedades luminescentes e analisar influência dos solventes, do método de síntese e cristalização na obtenção de diferentes polimorfos, bem como a influência destes na luminescência.

### *Objetivos específicos*

Os objetivos específicos deste trabalho são

1. Síntese de N,N'-(2,3-Difenil-6,7-quinoxalinedi-il)bis[4-metilbenzenesulfonamida] (**1**).
2. Recristalizar **1** em diversos solventes e mistura de solventes, ou ainda, por resfriamento lento.
3. Difratar e refinar a estrutura cristalina dos polimorfos recristalizados de **1**.
4. Fazer estudo de luminescência dos sólidos e em solução de **1**.

---

<sup>1</sup> (a) Z. Chen, V. Stepanenko, V. Dehm, P. Prins, L. D. A. Siebbeles, J. Seibt, P. Marquetand, V. Engel, F. Würthner. Photoluminescence and Conductivity of Self-Assembled  $\pi$ - $\pi$  Stacks of Perylene Bisimide Dyes *Chem. Eur. J.* **2007**, *13*, 436-449. <https://doi.org/10.1002/chem.200600889> (b) Y. Shao, G.-Z. Yin, X. Ren, X. Zhang, J. Wang, K. Guo, X. Li, C. Wesdemiotis, W.-B. Zhang, S. Yang, M. Zhu, B. Sun. Engineering  $\pi$ - $\pi$  interactions for enhanced photoluminescent properties: unique discrete dimeric packing of perylene diimides. *RSC Adv.*, **2017**, *7*, 6530-6537. <https://doi.org/10.1039/C6RA28147H>

## Metodologia

O composto **1** será sintetizado a partir da 1,2-fenilenodiamino de acordo com a rota de síntese indicada na Figura 1.<sup>2</sup>

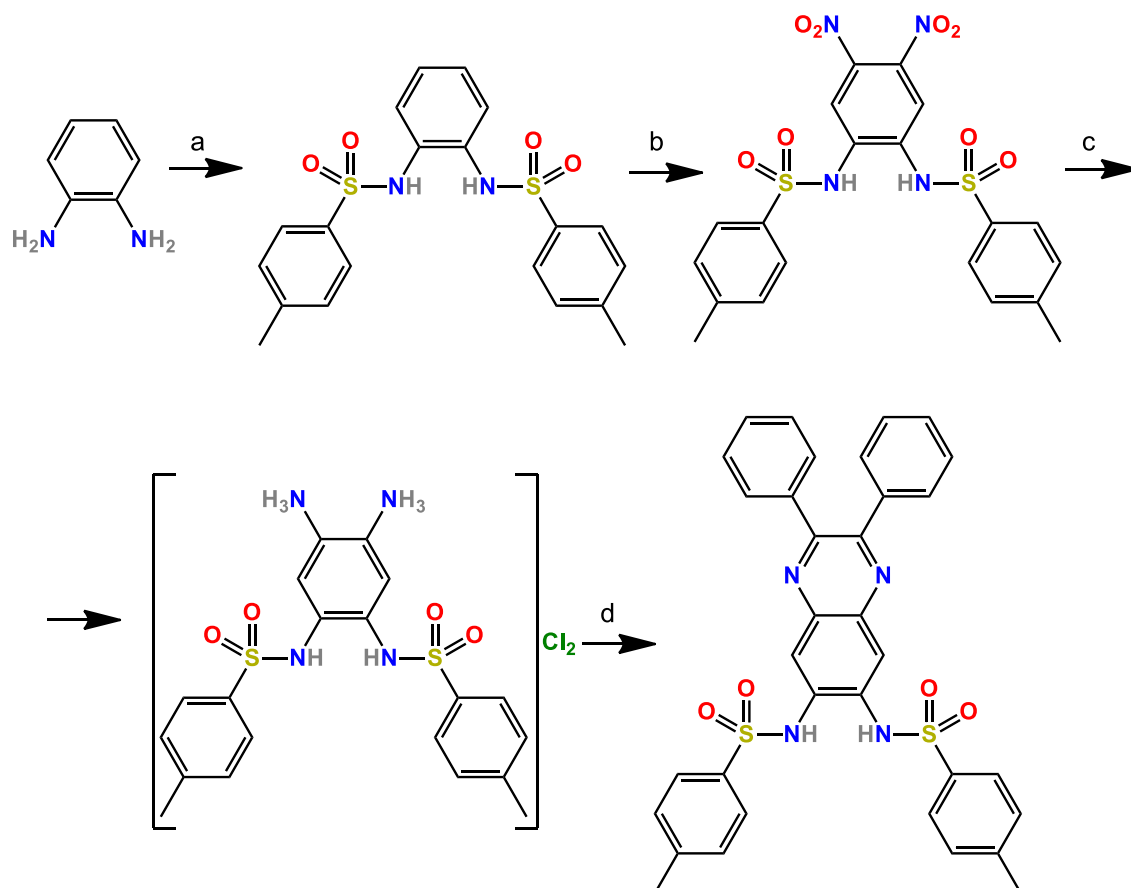


Figura 1 – Síntese de **1** a partir de 1,2-fenilenodiamino. Etapas de síntese: a) 2TsCl, piridina; b) Ácido nítrico fumegante, ácido acético; c) Sn, HCl/EtOH; d) Benzil, MeOH.

Após a síntese de **1**, que será acompanhada por ponto de fusão dos intermediários e eventualmente por espectroscopia de absorção na região do infravermelho ou ressonância magnética nuclear, ele será recristalizado em diferentes ambientes químicos. Para isto ele será dissolvido em solventes de diferentes polaridades, capazes de realizar ou não ligação de hidrogênio e deixar evaporar lentamente em diferentes temperaturas: temperatura ambiente, em estufa a 15 °C e em resfriamento lento de soluções saturadas.

<sup>2</sup> C. Lochenie, K. G. Wagner, M. Karg, B. Weber. Modulation of the ligand-based fluorescence of 3d metal complexes upon spin state change. *J. Mater. Chem. C*, **2015**, 3, 7925-7935. <https://doi.org/10.1039/C5TC00837A>

