

INVESTIGAÇÃO TEÓRICA E EXPERIMENTAL DO EFEITO DA TEMPERATURA NO SOLVATOCROMISMO DE LUMINESCENTES ORGÂNICOS EM MEIOS LÍQUIDOS

J. P. Chaves Barbosa, S. C. S. Costa, A. A. Hidalgo

*Universidade Federal do Piauí, Departamento de Física, 64.049-5504,
Teresina – PI, Brasil.*

As propriedades eletrônicas dos semicondutores orgânicos [2-4-biphenyly-5-fenil-1-3-4-oxadiazole] (PBD) e [2,5 – difeniloxazol] (PPO), são de grande interesse. Estes materiais são bem conhecidos por sua luminescência intensa e são utilizados como dispositivos de injeção em camadas orgânicas. No entanto, as propriedades fotofísicas destes compostos apresentam uma forte correlação com as propriedades de funcionamento dos dispositivos. Caracterizações espectroscópicas foram feitas em diferentes solventes. Nós associamos às caracterizações experimentais as ferramentas de simulação computacional, com base em métodos de química quântica. As estruturas químicas foram otimizados usando a DFT híbrido com B3LYP funcional, associados com o conjunto 6-311 + G de base (d,p) e carga ChelpG [1] ajustado em PCM modelo [2]. Todos calculos foram realizados no programa Gaussian03 [3]. Experimentalmente, a absorvância máxima para PPO foi observada em clorofórmio a 306 nm com pequenas mudanças de etanol e acetonitrilo em 303 nm. Por outro lado, os cálculos teóricos indicam que o pico maximo da banda apresenta uma variação de 292.11nm a 290.4 entre Clorofórmio e água. Desta forma, observa-se que os cálculos teóricos sobrestimar o máximo comprimento de onda. No entanto, se se comparar a mudança produzida devido aos solventes, os resultados teóricos e experimentais estão bem correlacionados com 2 nm de deslocamento azul em curso a partir de água para clorofórmio para etanol , metanol e acetonitrilo. Intensidades experimentais de absorvância pode ser comparado com momentos de transição teóricos, em ambos os casos, no máximo é obtida por clorofórmio. Etanol, metanol e acetonitrila mostram os resultados da simulação muito semelhantes no entanto, os resultados experimentais mostram diferenças consideráveis. Estes resultados alterações de intensidade pode estar relacionada com a natureza do solvente-soluto, interações específicas, esta hipótese deve ser testada usando métodos sequenciais que envolvem moléculas expressas como simulações de Monte Carlo que estão em progresso. Observações semelhantes foram obtidas para PBD, cálculos teóricos sobrestimar os comprimentos de onda, as mudanças são correctas, mas as taxas de intensidade diferentes dos resultados experimentais.

Referência

- [1] C. M. Breneman and K. B. Wiberg, “Determining atom-centered monopoles from molecular electrostatic potentials - the need for high sampling density in formamide conformational-analysis,” *J. Comp. Chem.*, **11** (1990) 361-73.
- [2] S. Miertus, E. Scrocco, J. Tomasi; *Chem. Phys.* 55 (1981) 117-129.
- [3] Frisch, M. J. Gaussian 03, Revision D.01 Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2004.

Suporte Financeiro: CAPES, CNPq, FINEP, FAPESPI, INEO, UFPI.