

ESTUDO SOLVATOCRÔMICO DE MATERIAIS FLUORESCENTES

Gabriela M. Scobar¹ (IC), Roberto S. N. Júnior (PQ)¹¹Universidade Federal de Itajubá**Palavras-chave:** Materiais fluorescentes. Absorção. Espectroscopia. Ditiazol.**Introdução**

O relatório aborda o estudo de uma série de moléculas orgânicas semicondutoras, denominadas EMM, compostas por um núcleo central de ditiazol e diferentes radicais. Essas moléculas possuem propriedades fotofísicas modificáveis, tornando-as candidatas para aplicações tecnológicas, como sensores, dispositivos eletrônicos e OLEDs.

O estudo visa investigar como as variações estruturais afetam a absorção e emissão de luz dessas moléculas, utilizando a espectroscopia de absorção e variando os solventes para identificar as melhores condições experimentais.

Metodologia

Teste de Solubilidade: As moléculas EMM foram dissolvidas em diferentes solventes, como hexano, tolueno, clorofórmio, DMSO, acetonitrila, etanol e propanol. O clorofórmio se mostrou o solvente mais eficaz.

Pesagem: Foram pesadas amostras de cada molécula utilizando uma balança de precisão, garantindo que as concentrações utilizadas nas análises fossem consistentes.

Obtenção da Absorção: A espectroscopia foi utilizada para medir a absorção das moléculas. Após uma calibração com clorofórmio puro, as amostras foram analisadas, e os dados foram transformados em gráficos de absorção em função do comprimento de onda.

Resultados e discussão

Os resultados da espectroscopia de absorção mostraram que todas as moléculas EMM apresentaram mudanças na faixa de comprimento de onda entre 250 e 550 nm.

As moléculas foram organizadas em 3 grupos com base em suas estruturas, permitindo a comparação das suas

propriedades de absorção e radiação. Alterações nos radicais resultaram em deslocamentos das bandas de absorção e absorvendo em comprimentos de onda mais longos, com moléculas contendo substituintes maiores, como antraceno e pireno.

O volume das moléculas mostrou uma grande alteração na banda de absorção. E a introdução de grupo dimetilamina elevou o comprimento de onda de absorção e dificultou a emissão fluorescente. Já a molécula EMM-06, com grupos metoxi e hidroxila, apresentaram menor eficiência de absorção em comparação às demais do terceiro grupo comparado.

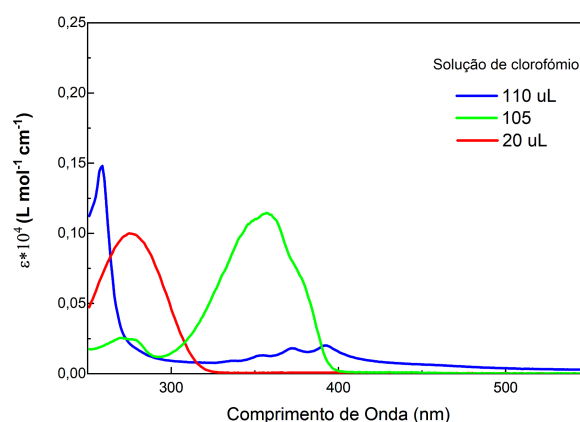


Figura 1 - comparação das primeira moléculas

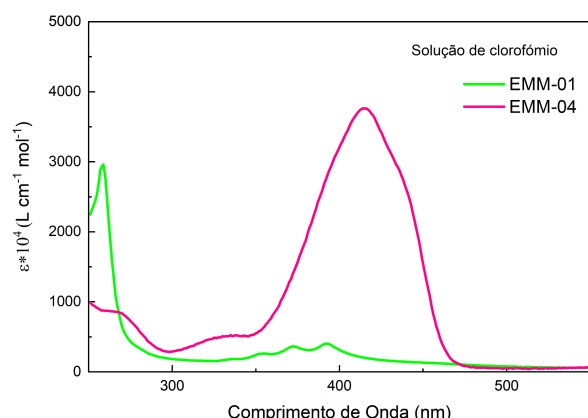


Figura 2 - comparação das moléculas com Dimetilamina

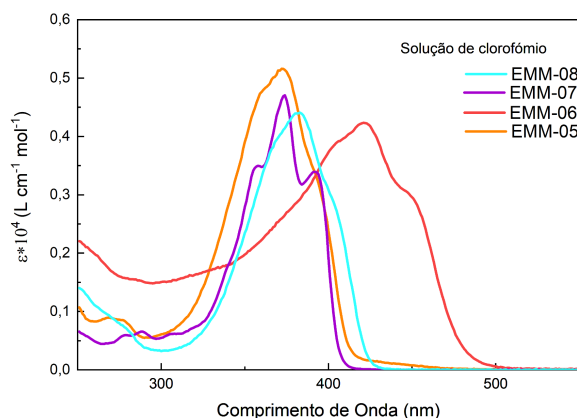


Figura 3 - comparação das últimas moléculas

Conclusões

O estudo demonstrou que essas pequenas alterações estruturais nas moléculas EMM têm um impacto significativo nas suas propriedades de absorção e emissão de luz.

O uso do clorofórmio como solvente foi fundamental para garantir a solubilidade adequada das moléculas e obter resultados precisos.

O estudo das propriedades fotofísicas dessas moléculas abre novas possibilidades para o desenvolvimento de materiais fluorescentes com tecnologias avançadas, especialmente em sensores, bioimagem e dispositivos emissores de luz. O controle das condições experimentais e o entendimento detalhado das interações moleculares foram essenciais para a interpretação dos dados obtidos.

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador, professor Dr. Roberto Shigueru Nobuyasu Júnior, por compartilhar seus conhecimentos e me guiar durante a pesquisa. Agradeço também aos meus colegas, alunos do grupo de pesquisa, e aos meus amigos, que me ajudaram durante todo o ano.

Sou igualmente grata à Unifei e à PIBIC pelo apoio proporcionado através da bolsa de Iniciação Científica, que tornou possível o desenvolvimento desta pesquisa.

Referências

ATVARS, Teresa D. Z. Espectroscopia de Luminescência. Chemkeys, Campinas: Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química, 2002. Disponível em: www.chemkeys.com. Acesso em: 20 set. 2024.

ABREU, Laís Gonçalves de. Elaboração de um material didático para o estudo e caracterização de semicondutores orgânicos a partir da espectroscopia de luminescência. Itajubá: Universidade Federal de Itajubá, 2023. Relatório final - Programa PIBIC FAPEMIG. 30 p.

NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. PubChem Compound Summary for CID 2823887, Thiazolo[5,4-d]thiazole. PubChem. Disponível em: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Thiazolo_5_4-d_thiazole. Acesso em: 22 set. 2024.

ROSA, José Otavio, Absorção de luz UV por polímeros orgânicos. Itajubá: Universidade Federal de Itajubá, 2022. Relatório final - Programa PIBIC FAPEMIG.

Atkins, P., & De Paula, J. (2011). Atkins' Physical Chemistry. 9th edition, Oxford University Press.