

## ESTUDO, CARACTERIZAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE MATERIAIS ORGÂNICOS QUE APRESENTAM FLUORESCÊNCIA ATRASADA TERMICAMENTE E FOTOLUMINESCÊNCIA DE LONGA DURAÇÃO

Lais Gonçalves de Abreu<sup>1</sup> (IC), Roberto Shigueru Nobuyasu Júnior(PQ)<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal de Itajubá

**Palavras-chave:** Espectroscopia UV-Vis. Semicondutores orgânicos. Matéria condensada. Física experimental.

### Introdução

No panorama da indústria e consumo, onde há um viés sustentável, eficiente e econômico acerca dos produtos eletrônicos, se faz presente tecnologias que utilizam como matéria-prima materiais orgânicos em seus componentes. Como dito em Almeida (2016), um exemplo das aplicações dos componentes são os diodos orgânicos emissores de luz, OLEDs, que constituem telas mais flexíveis e de melhor resolução em *smartphones* e *displays*.

Para que essas tecnologias cheguem ao mercado, é preciso que estudos sobre os compostos orgânicos, mais precisamente os que contêm características semicondutoras, mencionados em Fernandes Filho (2020), sejam desenvolvidos nas universidades, por meio do estudo e da caracterização fotofísica.

Nessa vertente, esta pesquisa tem como principal objetivo comparar as estruturas das cadeias de dois compostos, pertencentes ao grupo funcional *isocriptolepina*, avaliando seus estados energéticos excitados e suas intensidades, por meio de análises de gráficos de emissão.

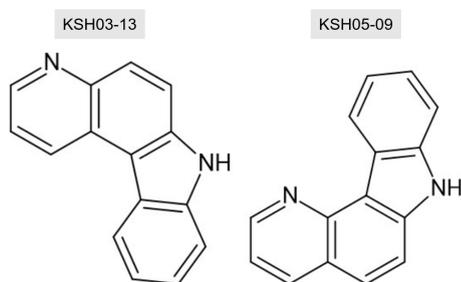


Figura 1 - Estrutura molecular KSH03-13 e KSH05-09

### Metodologia

Neste trabalho, foram feitas soluções com as moléculas

KSH03-13 e KSH05-09, utilizando de pequenas concentrações dissolvidas em três diferentes solventes, o Diclorometano (DCM), o Tetraidrofurano (THF) e o Tolueno (Tol). Essas amostras foram pesadas em uma balança de precisão e foram colocadas em frascos âmbar e posteriormente, por meio de micropipetas, foram adicionados os solventes.

Após a obtenção das amostras, elas foram colocadas, individualmente, em uma cubeta opaca de silício, para que não haja a absorção da luz incidente deste recipiente, de acordo com a Lei de Beer-Lambert, mostrada em Filhot et al. (2010). Assim, utilizando a espectroscopia no UV-Vis, especificada em Pavia et al. (2016), obtemos os espectros de emissão das amostras em diferentes comprimentos de onda, por meio do equipamento espectrofluorímetro. Em especial às amostras em THF, onde foi colhido o espectro à medida que se acrescentou água deionizada em ambos os materiais.

Posteriormente, os dados obtidos foram impressos em gráficos que mostram o comprimento de onda x intensidade, de modo que seja possível a comparação das amostras. Também, a partir desses gráficos, foi feito um ajuste Gaussiano para obter a convolução dos espectros, a fim de analisar os picos com os estados enérgicos dessas moléculas, como em Sípos e Sima (2020).

Utilizando a técnica de filmes finos por gotejamento, a partir da junção de um polímero - neste caso o PMMA - com uma pequena quantidade da solução em uma placa de quartzo, foi possível realizar os espectros de fluorescência e de fosforescência e analisar suas condições e propriedades.

### Resultados e discussões

Inicialmente, as estruturas das moléculas se diferenciam apenas pela simetria, pois elas apresentam os mesmos

átomos, diferenciadas apenas na posição do nitrogênio. Veja abaixo os gráficos de fotoluminescência das moléculas KSH 03-13 e KSH 05-09 em diferentes solventes.

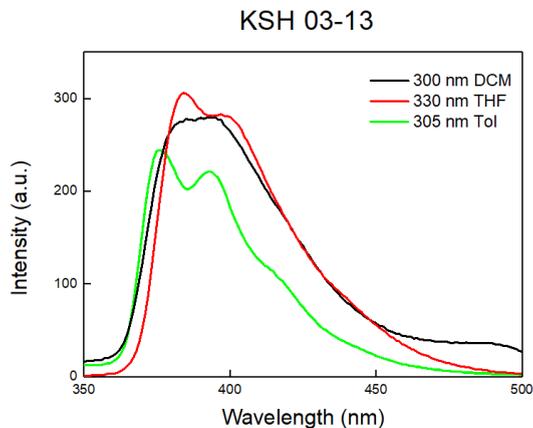


Gráfico 1: Emissão da molécula KSH 03-13 em diferentes solventes

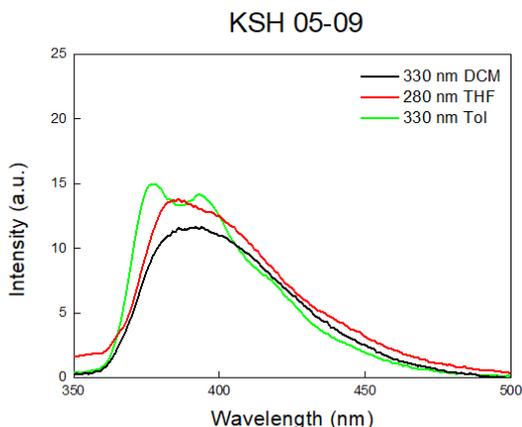


Gráfico 2 - Emissão da molécula KSH 05-09 em diferentes solventes

Com base nos gráficos 1 e 2, é possível identificar diferenças entre as bandas formadas, observando que as amostras realizadas em DCM apresentaram menor resolução enquanto as bandas em Tol possuem maiores resoluções. Em relação entre os compostos, a molécula KSH05-09 tem bandas mais alargadas em relação à molécula KSH03-13.

A partir da convolução das curvas dos espectros obtidos, é possível identificar picos que definem os estados energéticos excitados de energia e suas transições vibracionais e radiativas, podendo identificar também uma banda mais larga à direita, exibindo um componente dos estados agregados do sistema.

Com a intensidade normalizada, os espectros coletados dos filmes finos, nos mostram os gráficos de

fluorescência dessas moléculas, juntamente com a absorção de energia.

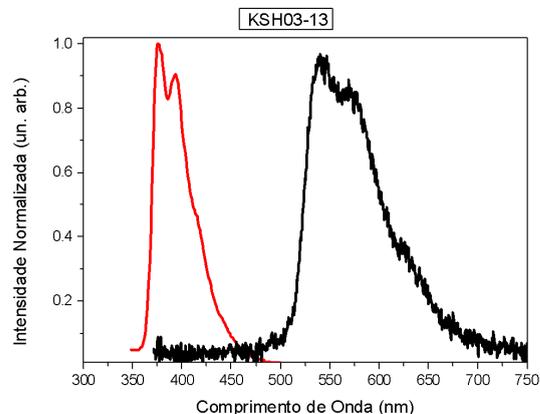


Gráfico 3 - Absorção e fluorescência da molécula KSH03-13 em baixas temperaturas

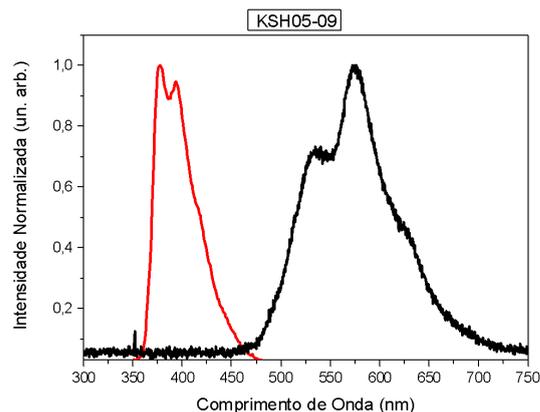


Gráfico 4 - Absorção e fluorescência da molécula KSH05-09 em temperatura ambiente

De acordo com os gráficos 3 e 4, é possível identificar que essas moléculas absorvem energia entre 350 a 425 nm e que a molécula KSH05-09 se destaca por apresentar fosforescência em temperatura ambiente.

## Conclusões

A molécula KSH05-09 aparenta ser mais suscetível à polaridade do ambiente ao qual ela está inserida e ao apresentar uma banda gaussiana alargada em menor energia sugere que possua um maior número de conformações estruturais. De modo geral, o solvente Tol possui menor polaridade, gerando espectros com maior resolução, por conta da menor interação com os dipolos das moléculas de estudo.

Além disso, de acordo com a simetria das moléculas, o

composto KSH03-13 apresenta um nitrogênio para fora de sua cadeia, mudando seus modos vibracionais e resultando em maiores configurações no estado singleto. Já, em relação à molécula KSH05-09, seus espectros de fosforescência sugerem maiores estados tripleto, pois acontecem à temperatura ambiente, por isso, esse comportamento é considerado raro.

Com as análises obtidas, não é possível comparar suas intensidades, pois as concentrações foram diferentes. Entretanto, essas moléculas podem ser utilizadas na composição de componentes orgânicos, porém nesta configuração de sistema estudado, elas apresentaram baixa intensidade em relação a outros grupos de polímeros.

## Agradecimento

Primeiramente, agradeço ao meu orientador Roberto pela oportunidade de ser sua aluna de Iniciação Científica, como também agradeço à Universidade Federal de Itajubá e ao Instituto de Física e Química pelo apoio financeiro, por meio da bolsa.

Agradeço a colaboração dos grupos: “Espectroscopia de Materiais”, liderado por Alexandre Marletta da Universidade Federal de Uberlândia pelo aparato experimental, ao “Organic Chemistry”, liderado por Magne Sydnnes na University of Stavanger, pela síntese dos materiais utilizados e ao Projeto APR00052-21 da FAPEMIG.

Também sou grata aos meus familiares e amigos pelo apoio e companheirismo de sempre, em especial, aos meus amigos e colegas de pesquisa: Carlos, Isadora e José Otávio.

## Referências

ALMEIDA, T. dos R. **Investigação teórica da agregação de complexos catiônicos de Ir (III) com potencial aplicação em LEEC's e OLED's**. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo, 2016.

FERNANDES FILHO, J. **Polímeros condutores: uma breve introdução ao assunto**. Trabalho de Conclusão de Curso. Universidade Federal de São Carlos, 2020.

FILHOT, H. B.; KRUG, F. J.; ZAGATTO, E. A. G.; & ROCHA, F. R. P.; et al. **Espectrofotometria no Ultravioleta e Visível**. Universidade de São Paulo, 2010.

SÍPOS, R.; SIMA, J. **El Diagrama de Jablonski Revistado**. *Revista Cubana de Física*, v. 37, n. 2, p. 125-131, 2020.

PAVIA, Donald L.; LAMPMAN, Gary M.; KRIZ, George S.; VYVYAN, James R. **Introdução à espectroscopia**. [Brasil]: Cengage Learning Brasil, 2016.