



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



Evento	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2016
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Estudo fotofísico de Bis-arilsulfenil- e Bis-arilselenil-benzo-2,1,3-tiadiazóis
Autor	CRISTTOFER DE MOURA SANTOS
Orientador	PAULO FERNANDO BRUNO GONCALVES

Estudo fotofísico de Bis-arilsulfenil- e Bis-arilselenil-benzo-2,1,3-tiadiazóis

Autor: Cristtofer de Moura Santos Orientador: Paulo F.B Gonçalves.

Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Química, Grupo de Química Teórica.

Introdução:

Moléculas da classe dos benzo-tiadiazóis possuem um grande interesse devido a sua aplicação em células solares. O objetivo deste trabalho é estudar diferentes estruturas que fazem transições do estado fundamental (S_0) para o estado excitado (S_1), prever suas características utilizando cálculos teóricos e compará-las a dados experimentais.

Metodologia:

Foram propostas 6 estruturas da classe Bis-arilsulfenil-benzo-2,1,3-tiadiazol (1) e 4 estruturas da classe Bis-arilselenil-benzo-2,1,3-tiadiazol (2); inicialmente foi feita uma análise conformacional de cada uma das moléculas propostas para descobrir a conformação menos energética, e esta foi confirmada por análise vibracional. Em seguida, utilizando a conformação menos energética, foram calculados os espectros de absorção de cada molécula utilizando a Teoria do funcional da densidade dependente do tempo (TD-DFT); os funcionais utilizados foram PBE1PBE e CAM-B3LYP, com o conjunto de base cc-pVDZ para cálculos de otimização geométrica e cc-pVTZ para obter as energias de transição e outras propriedades das moléculas.

Para poder incluir o efeito de solvente nos cálculos, utilizou-se o modelo do contínuo polarizável com o formalismo da equação integral (IEF-PCM), onde foram utilizados solventes com constantes dielétricas diferentes, foram estes: etanol, hexano, tolueno, diclorometano, N,N-dimetil-formamida para o PBE1PBE e hexano, tolueno, 1,4-dioxano, diclorometano para o CAM-B3LYP.

Conclusão:

Experimentalmente foi visto que os derivados de (1) apresentam absorção na região do visível ($\sim 420\text{nm}$) e, utilizando isto foi possível mostrar que há uma transição eletrônica $\pi-\pi^*$ quase sem nenhum efeito solvatocromico. Mostrou-se também uma emissão na região do verde (514-570nm) com um grande deslocamento de Stokes que foi associado a uma transferência de carga no S_1 .

Os cálculos teóricos com CAM-B3LYP tem uma ótima concordância com os valores obtidos experimentalmente e permitem conclusões análogas; isto auxilia na confiabilidade dos dados obtidos e na veracidade das conclusões feitas tanto experimentalmente quanto por cálculos teóricos.