

213

ESTUDO TEÓRICO DE BENZAZOLAS ELETROLUMINESCENTES. Eduardo F. Laschuk, Paolo R. Livotto (Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, UFRGS).

A pesquisa em materiais orgânicos eletroluminescentes é relativamente recente, porém é uma área de grande interesse acadêmico e industrial. O interesse acadêmico abrange questões tais como os mecanismos de condução elétrica, injeção de carga, emissão luminosa, degradação e semicondutividade. O interesse industrial está na produção de uma grande variedade de produtos baseados em filmes eletroluminescentes, tais como iluminação portátil, mostradores alfanuméricos, telas de vídeo coloridas para computador e televisão, entre outros. Este trabalho tem o objetivo de estudar teoricamente as propriedades eletroluminescentes do bis-2-(o-hidroxifenil)benzoxazolato de zinco, e, após, outros compostos assemelhados (os benzotiazolatos e benzoimidazolatos correspondentes, de zinco e outros metais). A metodologia de pesquisa envolve, num primeiro momento, a determinação da geometria destas moléculas por cálculos semi-empíricos (métodos PM3 e MNDO/d) realizados no CESUP. Após, realizam-se cálculos semi-empíricos das transições eletrônicas (método INDO/S). Na eletroluminescência, o campo elétrico promove diretamente as transições eletrônicas, as quais são previstas por nossos cálculos. Podemos assim fazer previsões sobre o espectro de emissão da molécula. Já fizemos cálculos da geometria do bis-2-(o-hidroxifenil) benzaxolato de zinco e de suas transições eletrônicas *in vacuo*. Estamos agora trabalhando para fazer estes cálculos considerando o sistema em solução. Estamos empregando o método do campo de reação, em que se simula o sistema dentro de uma cavidade esférica do solvente. Estamos também trabalhando com um método misto, em que a molécula central é solvatada por algumas moléculas, estando todo o sistema numa cavidade esférica. (CNPq/FAPERGS)