

088

ESTUDO TEÓRICO DE COMPLEXOS ELETROLUMINESCENTES. *Eduardo F. Laschuk, Paolo R. Livotto*
(Dep. De Físico-Química, IQ-UFRGS)

Recentemente tem havido grande interesse científico e industrial em materiais orgânicos eletroluminescentes. Tais materiais podem ser utilizados para a fabricação de diversos dispositivos emissores de luz, tais como monitores delgados para computador e painéis luminosos. O presente trabalho enfoca um conjunto de complexos luminescentes que representa uma fração importante das substâncias eletroluminescentes conhecidas. Mais especificamente, estudaram-se complexos de metais dos grupos 2, 12 e 13 com quelantes como: 8-hidroxiquinolina (q), 2-estiril-8-hidroxiquinolina (sq), 8-mercaptoquinolina (mq), 10-hidroxi benzo[h]quinolina (bq), 2-(o-hidroxifenil)benzoxazola (hbo) e as benzimidazolas e benzotiazolas correspondentes (hbi e hbt respectivamente). Foram realizados estudos utilizando métodos semi-empíricos (AM1, PM3 e ZINDO/s) para determinar as geometrias de complexos eletroluminescentes ou potencialmente eletroluminescentes nos estados fundamental e excitado, bem como no cálculo de energias de transições eletrônicas (excitação e decaimento), que fornecem o espectro eletrônico. Os dados experimentais disponíveis para as transições foram comparados com os valores calculados correspondentes. Observaram-se ainda diferenças nas estruturas de estado excitado e fundamental de complexos, notando-se em alguns um fenômeno análogo ao da transferência protônica no estado excitado. (CNPq-PIBIC/UFRGS)