

## **Síntese, caracterização e estudo das propriedades fotofísicas de um novo análogo de isoxazol com potencial de aplicação em dispositivos orgânicos optoeletrônicos**

ANA CAROLINA FERREIRA DE BRITO (Autor), JASON GUY TAYLOR (Co-Orientador), THIAGO CAZATI (Orientador)

Isoxazóis são conhecidos devido seu potencial em atividades biológicas, mas têm sido inexplorados como intermediários sintéticos para aplicações em ciência dos materiais. Estes compostos heterocíclicos de cinco membros podem compor o núcleo rígido de moléculas capazes de exibir mesofases (caráter líquido-cristalino), além de deslocalizarem elétrons em sistemas conjugados. Tais características tornam esta classe de compostos candidatos promissores para aplicação em eletrônica orgânica. O objetivo deste trabalho foi sintetizar um novo análogo de isoxazol luminescente, caracterizá-lo estruturalmente e estudar suas propriedades optoeletrônicas a fim de avaliar seu potencial para aplicação em dispositivos orgânicos optoeletrônicos. Um novo isoxazol foi sintetizado em quatro etapas sintéticas. O análogo inédito obtido foi o 1,3-bis(3-(2-(octiloxi)fenil) isoxazol-5-il) benzeno (denominado LED 01). A molécula LED 01 em solução apresentou absorção óptica na região do ultravioleta (de 290 nm a 330 nm), com comprimento máximo de absorção centrado em 306 nm. Os coeficientes de absorvidade molar ( $\epsilon$ ) foram de 4056,43 L.mol<sup>-1</sup>.cm<sup>-1</sup> em clorofórmio e de 2358,82 L.mol<sup>-1</sup>.cm<sup>-1</sup> em dimetilformamida; sua eficiência quântica de fluorescência em dimetilformamida ( $\Phi_F = 0,03$ ) apresentou maior valor que em clorofórmio ( $\Phi_F = 0,01$ ). Além disso, os comprimentos máximos de emissão foram centrados em 344 nm e 350 nm, para dimetilformamida e clorofórmio, respectivamente. A análise por voltametria cíclica estimou para o nível de energia do HOMO (do inglês, highest occupied molecular orbital) o valor de 5,02 eV. Os valores encontrados para o nível de energia do LUMO (do inglês, lowest unoccupied molecular orbital) e a energia de gap, equivalentes a 1,21 eV e 3,81 eV, respectivamente, tornam a LED 01 um material promissor para utilização em dispositivos optoeletrônicos como modificador de interface, a fim de facilitar a extração/ejeção de cargas.

Instituição de Ensino: Universidade Federal de Ouro Preto