

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos**

**XII Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos**

Livro de Resumos

**São Carlos
2022**

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 12

Coordenadores

Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Junior

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Adonai Hilario

Arthur Deponte Zutião

Elisa Goettems

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Henrique Castro Rodrigues

Jefter Santiago Mares

João Victor Pimenta

Julia Martins Simão

Letícia Martinelli

Lorany Vitoria dos Santos Barbosa

Lucas Rafael Oliveira Santos Eugênio

Natasha Mezzacappo

Paulina Ferreira

Vinícius Pereira Pinto

Willian dos Santos Ribela

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrandiono

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

(12: 10 out. - 14 out. : 2022: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por Adonai Hilario [et al.]. São Carlos: IFSC, 2022.

446 p.

Texto em português.

1. Física. I. Hilario, Adonai, org. II. Título

ISBN: 978-65-993449-5-4

CDD: 530

IC45

Estudos de espectroscopia óptica estacionária e resolvida no tempo em novas moléculas de corróis base livre

FRANÇA, Diego; BONI, Leonardo de

diegofdeoliveira@usp.br

O projeto tem como objetivo a caracterização espectroscópica de uma dupla de corróis com dois ligantes laterais de pentafluorofenil, sendo distinguíveis por seu terceiro ligante característico, um com carbazol (Cbz-corrol) e outro com fenotiazina (Ptz-corrol). Compreender seu comportamento fotofísico é importante para descrever seus processos de conversão de energia e, dessa forma, descobrir o melhor tipo de aplicação para estas moléculas. (1) Primeiramente é feito o estudo de absorção e fluorescência estacionária para as amostras dissolvidas em diclorometano (DCM) e dimetilsulfóxido (DMSO). Foi possível obter a eficiência quântica de fluorescência (Φ_f) para cada uma das amostras em solução através de um método indireto, por comparação com uma amostra de referência. É feita análise dos tempos de vida da fluorescência (τ_f) utilizando um laser pulsado de femtossegundos. Por fim, é utilizada uma técnica com excitação por duplo pulso laser a fim de observar a formação de estados tripletos entre os pulsos, o que resulta na eficiência de formação de triplete (Φ_T). Com todos os valores determinados, é possível calcular as taxas de decaimento das moléculas em solução. O espectro de absorção das moléculas se mostrou bastante semelhante entre todas as soluções. As moléculas dissolvidas em DMSO, no entanto, apresentaram abertura da banda de solet proveniente da tautomerização das espécies em solução, sofrendo também alterações em suas bandas Q pelo mesmo motivo. Foi descoberto que as amostras dissolvidas em solvente mais polar, de DMSO, apresentaram maior eficiência quântica de fluorescência. Apesar disso, os tempos de vida de fluorescência permaneceram semelhantes para todas as amostras, sendo próximos a 4ns para todas as amostras. Dada a estabilidade de τ_f e o aumento de Φ_f , consequentemente houve um aumento das taxas radiativas nas amostras dissolvidas em DMSO, acompanhada de uma diminuição das taxas não-radiativas. Esse efeito foi atribuído à presença dos grupos laterais dos corróis, que são capazes de formar ligações de hidrogênio em solventes polares graças aos átomos de flúor do grupo pentafluorofenil, bastante eletronegativos. As ligações estabilizam o movimento desses ligantes, tornando a molécula mais rígida e menos propensa a dissipar energia de forma não-radiativa. (2) Esse efeito foi capaz de quase dobrar a eficiência quântica de fluorescência da amostra Cbz-Corrol, passando de 2.4 em DCM para 4.4 em DMSO. Essa amostra em DMSO também apresentou o menor Φ_T , indicando que o ligante lateral de carbazol aumenta a conversão interna da molécula, o que pode ser explicado por sua capacidade trocar energia com o anel central, evidenciado em um estudo anterior. (3) A amostra Ptz-Corrol manteve uma eficiência de tripletização de 30% no solvente mais polar, o que pode ser explorado para aplicações em terapia fotodinâmica em pesquisas futuras.

Palavras-chave: Fluorescência. Espectroscopia. Óptica.

Agência de fomento: FAPESP (2021/07350-3)

Referências:

- 1 AVIV, I.; GROSS, Z. Corrole-based applications. **Chemical Communications**, n. 20, p. 1987-1999, 2007. DOI: 10.1039/B618482K.
- 2 GOTARDO, F. *et al.* Investigating the intersystem crossing rate and triplet quantum yield of Protoporphyrin IX by means of pulse train fluorescence technique. **Chemical Physics Letters**, v. 674, p. 48-57, Apr. 2017. DOI: 10.1016/j.cplett.2017.02.055.
- 3 SHIVAPRASADACHARY, B. *et al.* Light induced intramolecular energy and electron transfer events in carbazole–corrole and phenothiazine–corrole dyads. **Journal of Porphyrins and Phthalocyanines**, v. 24, n. 5-7, p. 693-704, 2020.