

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Em relação aos sete compostos derivados de di-naftalimidias (BUNDI (N,N'- (n-butil)-1,4,5,8-di-naftalimida); CLNDI (N,N'-(2-cloro-etileno)-1,4,5,8-di-naftalimida); BRNDI (N,N'-(2-bromo-etileno)-1,4,5,8-di-naftalimida); OHNDI (N,N'- (2-hidroxietileno)-1,4,5,8-di-naftalimida); DMNDI (N,N'-(N,N'-dimetiletilenodiamina)-1,4,5,8-di-naftalimida); DANDI (N,N'-amino-1,4,5,8-di-naftalimida); NDI (N,N'-1,4,5,8-di-naftalimida)) verificamos que tais compostos, mesmo apresentando o mesmo grupo cromofórico planar, mostraram propriedades fotofísicas e fotoquímicas distintas de acordo com os grupos substituintes e polaridade dos solventes utilizados. É relevante comentar que devido a esta planaridade (molécula rígida / sem rotação) o cromóforo teve pouca interação com os solventes aqui utilizados em comparação com as suas cadeias laterais (substituintes) que têm rotação levemente restrita mas interagem com os solventes e conduzem à formação de dímeros, trímeros etc no estado fundamental confirmando desta maneira a grande importância destes compostos como sondas de micro ambiente.

Ainda para estas di-naftalimidias, através de cálculos de variações de energia ΔE , ou seja; determinamos os espaçamentos dos níveis vibrônicos no estado excitado, concluímos que as bandas apresentadas nos espectros de absorção na região do UV-VIS são de uma mesma transição. Isto se fez necessário porque transições de caráter $n-\pi^*$ (S_0-S_2) poderiam estar aí convoluídas. Como resultado obtivemos os valores de ΔE constantes e as transições aqui observadas relativas às transições $\pi-\pi^*$ (S_0-S_1).

Não foi detectado solvatocristismo ou efeito solvatocrômico significativo para os sete compostos derivados de di-naftalimidias analisados. Foi observado um baixo rendimento quântico de fluorescência para os sete compostos estudados e portanto estudos relativos aos estados tripleto (em andamento no grupo) devem ser realizados.

De maneira clara verificamos que os sete compostos derivados de di-naftalimidias aqui estudados apresentaram propriedades fotofísicas diferentes e conseqüentemente terão diferentes aplicabilidades. De um modo geral nossas perspectivas futuras objetivam-se em aprofundar os estudos destes compostos buscando identificar suas aplicações, investigar o número de unidades monoméricas bem como estudar novos compostos com substituintes diferentes.

Ainda neste trabalho, que buscou estudar novos materiais, analisamos dois derivados de quinolinas: HIQ (3-alil-2-metilquinolin-4-ol) e CLQ (3-alil- 4-cloro-2-metilquinolina) verificando seu comportamento como fotobase através de ensaios fotoquímicos.

Através dos estudos de espectroscopia de absorção na região do UV-VIS e de emissão de fluorescência e excitação, para os compostos HIQ e CLQ observou-se o efeito do pH o qual notou-se diferenças espectrais em condições ácidas e básicas (transição observada S_0-S_1). Analisando os espectros UV-VIS dos dois compostos não foi verificado efeito de solvente se podendo afirmar que não há diferenças significativas das estruturas eletrônicas da moléculas (HIQ e CLQ) no estado excitado. Observa-se para o CLQ duas bandas com valores de $\lambda_{\max}^{\text{abs}}$ em torno de 319 e 306 nm e para o HIQ também duas bandas com valores de $\lambda_{\max}^{\text{abs}}$ em torno de 320 e 333 nm. Observou-se ainda um deslocamento batocrômico (deslocamento para maiores

comprimentos de onda ou, para o vermelho) nas bandas do HIQ devido ao auxocromo :ÖH (grupo saturado ligado ao cromóforo) que tem um efeito mais pronunciado que o auxocromo "Cl", pertencente ao composto CLQ. Pelos valores obtidos das absorvidades molares para os dois compostos podemos concluir que a transição em estudo é de caráter $\pi-\pi^*$.

Os pKa's determinados experimentalmente para ambos os compostos mostraram-se bastante condizentes com os compostos análogos descritos na literatura.

Como perspectivas futuras objetivamos novas rotas sintéticas para alcançar os polímeros (oligômeros) derivados de quinolinas, uma vez que até o presente momento não obtivemos resultados positivos quanto a obtenção dos oligômeros, e efetuar ensaios fotoquímicos e fotofísicos. Ainda para darmos seqüência à esta linha de pesquisa almejamos sintetizar monômeros derivados de naftóis e estudar seu comportamento como fotoácido e a seguir sintetizar seus polímeros.