

# Espectroscopia Raman ressonante de complexos de transferência de carga doador-fulereno ( $C_{60}$ )

Larissa A. Cozer<sup>1</sup> (IC), Natália M. Monezi<sup>1</sup> (PG), Rômulo A. Ando<sup>1</sup> (PQ)\* [raando@iq.usp.br](mailto:raando@iq.usp.br)

<sup>1</sup>Laboratório de Espectroscopia Molecular – Instituto de Química – Universidade de São Paulo.

Palavras Chave: transferência de carga, espectroscopia Raman, fulereno.

## Introdução

Desde sua descoberta em 1985 por Kroto et al.,<sup>1</sup> o fulereno ( $C_{60}$ ) tem sido utilizado em diversas aplicações, especialmente na área de materiais na construção de dispositivos opticamente ativos, supercondutores, células solares, entre outros.<sup>2</sup> A principal característica que permite sua utilização, além da alta estabilidade, é o fato de possuir um sistema  $\pi$  conjugado bastante eficiente para aceitar elétrons. Portanto, frente a sistemas moleculares doadores de elétrons (D), há uma transferência de carga (CT) característica D- $C_{60}$ . Tal CT é geralmente caracterizada por espectroscopia eletrônica (UV-VIS), e depende essencialmente da capacidade doadora de D, e do solvente.<sup>2</sup> Apesar desses sistemas serem bastante conhecidos na literatura, poucos trabalhos exploram as características vibracionais desses complexos. Neste trabalho, além dos espectros UV-VIS, serão apresentados resultados obtidos por espectroscopia Raman ressonante de complexos D- $C_{60}$ , utilizando diferentes doadores. A vantagem da espectroscopia Raman ressonante consiste no fato de que apenas os modos vibracionais associados à transição eletrônica são intensificados, permitindo uma descrição detalhada da transição CT.

## Resultados e Discussão

A Figura 1 mostra os espectros de absorção dos complexos D- $C_{60}$  em que D = N,N-dimetilanilina (DMA) (a) e D = tetratiofulvaleno (TTF) (b) em solução de tolueno em diferentes concentrações de [D]. O aumento da absorvância observada no complexo DMA- $C_{60}$  com o aumento da concentração de amina evidencia a transferência de carga. Pode-se observar que, apesar do aumento da intensidade, não há deslocamento da banda de absorção, o que sugere que a interação é fraca e o complexo de transferência de carga formado pode ser classificado como “de contato”.<sup>3</sup>

No caso do TTF- $C_{60}$ , observa-se que com a adição da espécie doadora, não há variação significativa da banda do fulereno, mas é observado um deslocamento de cerca de 20 nm da banda do TTF (452 nm).

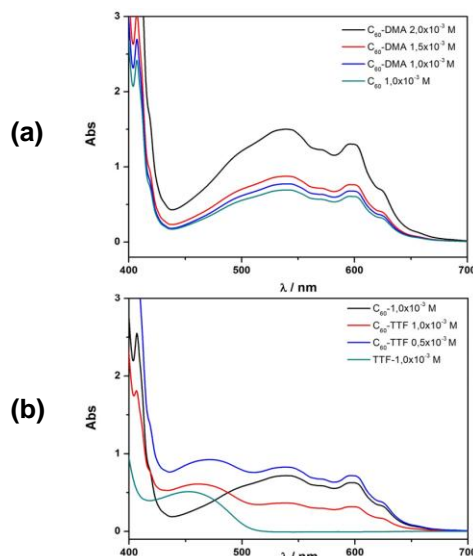


Figura 1. Espectros de absorção dos complexos de transferência de carga do  $C_{60}$  e DMA (a) e TTF (b) em tolueno em diferentes concentrações de [D].

Como pode ser observado, em ambos os casos, as alterações espectrais no UV-Vis são bastante sutis. Portanto torna-se importante a utilização de outras técnicas para caracterizar a transferência de carga nesses complexos. Neste trabalho serão apresentados os espectros Raman obtidos com radiações de energia similar a das transições CT, o que deve mostrar quais modos vibracionais estão associados à transição eletrônica. Pretende-se também realizar cálculos DFT e TDDFT para suportar os dados experimentais.

## Conclusões

A interação entre as espécies doadoras DMA e TTF com o  $C_{60}$  dá origem a transições de transferência de carga, observadas via espectroscopia UV-VIS. Tal interação pode ser considerada fraca e outras técnicas são requeridas para sua caracterização detalhada. Nesse caso, a espectroscopia Raman ressonante deve fornecer informações importantes acerca da transferência de carga D- $C_{60}$ .

## Agradecimentos

À FAPESP, CAPES e CNPq.

<sup>1</sup> Kroto, H. W.; Heath, J. R.; O'Brian, S. C.; Curl, R. F.; Smalley, R. R. *Letters to Nature* **1985**, *318*, 162.

<sup>2</sup> Bendikov, M. Wudl, F.; Perepichka, D. F. *Chem. Rev.* **2004**, *104*, 4891.

<sup>3</sup> Sun, Y. P.; Bunker, C.; Ma, B. *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 9699.