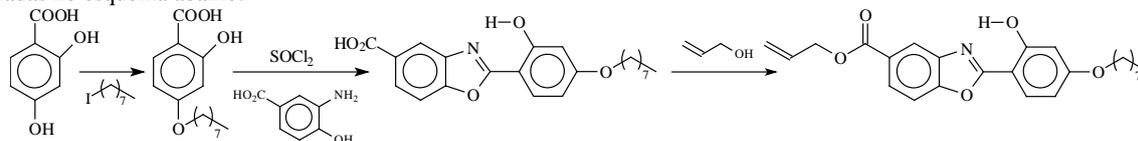


026

**SÍNTESE DE NOVOS DERIVADOS DO 2-(2'-HIDROXIFENIL)BENZOXAZOL.** *Bauer Ferrera, Fabiano S. Rodembusch, Leandra F. Campo, Valter Stefani* (Laboratório de Novos Materiais Orgânicos - Departamento de Química Orgânica - Instituto de Química - UFRGS).

Compostos heterociclos que apresentam fluorescência por transferência protônica intramolecular no estado excitado (ESIPT) apresentam grande interesse devido às suas aplicações como corantes para laser, estabilizantes poliméricos, sondas e traçadores biológicos ou industriais, entre outros. Este trabalho descreve a síntese de novos compostos fluorescentes com potenciais propriedades líquido-cristalinas, preparados a partir do ácido 2,4-dihidroxibenzoico, através das etapas sintéticas mostradas no esquema abaixo:

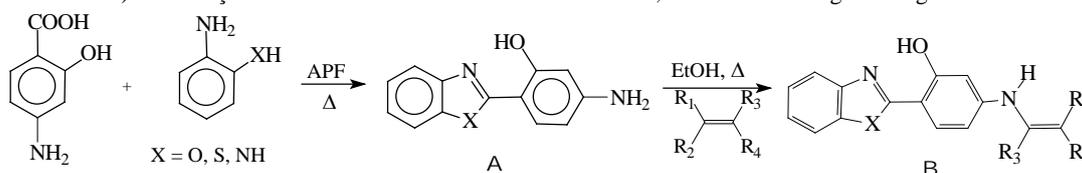


Os compostos obtidos foram caracterizados por métodos espectroscópicos clássicos. Uma extensão deste trabalho será a copolimerização destas moléculas com monômeros derivados do ácido acrílico visando obter novos polímeros fluorescentes. (PIBIC-CNPq, FAPERGS, CAPES).

027

**SÍNTESE DE NOVOS HETEROCICLOS BENZAZÓLICOS FLUORESCENTES COM POTENCIAL USO PARA A GERAÇÃO DE LASER.** Tanara Gressler (IC), Leandra F. Campo (PG), Fabiano S. Rodembusch (PG), Valter Stefani (PQ) (Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química - UFRGS).

Heterociclos do tipo benzazolas emitem fluorescência via transferência protônica intramolecular no estado excitado (ESIPT), despertando grande interesse tecnológico e sintético devido as suas aplicações, como corantes para laser, estabilizadores de polímeros frente a luz UV, em materiais para opto-eletrônica, etc. Este trabalho descreve a síntese de novos monômeros fluorescentes, preparados a partir do ácido 4-amino-2-hidroxibenzoico em duas etapas sintéticas: A) condensação com anilinas *orto*-substituídas e B) substituição nucleofílica com alcenos funcionalizados, como mostra a figura a seguir.



Os produtos obtidos foram caracterizados por técnicas de espectroscópicas usuais. As próximas etapas deste trabalho consistem na copolimerização destes compostos com MMA para a obtenção de novos polímeros fluorescentes com potencial uso para a geração de laser. (Agradecimentos: CNPq, FAPERGS, PROPESQ).

028

**ESTUDO TEÓRICO DA DINÂMICA DE SOLVATAÇÃO PARA SOLUÇÕES DE CCL<sub>4</sub> EM CCL<sub>4</sub>.** Edson Bernardi, Hubert Stassen (Departamento de Físico-Química - Instituto de Química - UFRGS).

Os processos de solvatação possuem grande importância na química por esta se tratar de uma ciência que trabalha fundamentalmente em fase condensada. Estudos teóricos sobre a dinâmica de solvatação de diversos sistemas, através da dinâmica molecular, têm auxiliado na elucidação dos mecanismos de solvatação. Neste trabalho, estudamos a dinâmica de solvatação para a mistura CCl<sub>4</sub>/CCl<sub>4</sub>, visto que este solvente é amplamente utilizado em reações químicas. Uma molécula foi excitada, através da alteração de um parâmetro no potencial Lennard-Jones aplicado e avaliou-se a resposta do solvente para essa perturbação em termos de contribuições atrativas, repulsivas e repulsivo-atrativas no modelo de potencial. Também foram avaliadas as correlações de 2 e 3 corpos e sua influência sobre a relaxação da energia. O sistema foi composto por 256 moléculas em um ensemble NVE, na temperatura de 298K e um volume molar de  $97,15 \cdot 10^{-06} \text{ m}^3/\text{mol}$ . Os resultados obtidos, mostram uma forte influência das contribuições repulsivas e repulsivas-atrativas, para a relaxação da energia do sistema ao novo estado de equilíbrio. Pode-se observar também que as correlações de 2 corpos atuam de maneira decisiva no processo de solvatação. (CNPq - PIBIC - UFRGS).

029

**ESTUDO DA PRESENÇA DE CUMARINAS NOS RESÍDUOS SÓLIDO E LÍQUIDO DA HIDRODESTILAÇÃO DA SEMENTE E RAIZ DE ANGELICA.** Rafaela L. Borella,, Ana C. A. dos Santos, Marcelo Rossato, Profa. Adriana E. Gower (Instituto de Biotecnologia / Universidade de Caxias do Sul).

Devido ao aumento acentuado na procura de fármacos de origem natural, foi estudada a espécie vegetal *Angelica archangelica* L., planta herbácea da família Apiacea, a qual apresenta cumarinas na sua composição química. Estas, possuem significativas atividades farmacológicas, além de serem utilizadas na indústria de produtos de limpeza e cosméticos devido ao seu odor característico. Os resíduos sólido e líquido obtidos do processo de hidrodestilação de óleos essenciais foram submetidos a uma extração em Soxhlet e extrator líquido-líquido respectivamente, durante um período de 32 horas. Para o sólido foram utilizados como solventes o hexano, diclorometano e etanol, para o líquido usou-se hexano, éter etílico e butanol. Após os extratos serem concentrados em evaporador rotatório, foram analisados por cromatografia de camada delgada e revelados com lâmpada UV (365 nm), onde observou-se a presença de manchas que por comparação com dados da literatura podem ser atribuídas às cumarinas, as quais, encontraram-se nos seguintes extratos: hexânico e diclorometânico do resíduo sólido e em todos os extratos do resíduo líquido da semente, assim como em todos os extratos do resíduo sólido e líquido da raiz. O extrato hexânico do resíduo sólido da semente, o qual apresenta quantidade razoável de um dos compostos químicos, está sendo purificado por precipitação com hexano e éter etílico destilado. Após filtração, o sólido foi recristalizado com éter etílico, e então foi feita a purificação por cromatografia de camada espessa, onde isolou-se um composto cristalino branco, que será analisado posteriormente por HPLC. (Bolsista de Iniciação Científica BIC/UCS).