

212

ESTUDO COMPUTACIONAL DA FOTOFÍSICA DO 4-(2'-BENZOXAZOLIL)-2,5-DIIDROXIBENZOATO DE ETILA. Maximiliano Segala, Dione Silva Correa e Valter Stefani (Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, CESUP, UFRGS).

Compostos orgânicos do tipo 2(2'-hidroxifenil)benzazolas apresentam grande interesse fotofísico, pois emitem luz fluorescência com grande deslocamento de Stokes devido a um significativo rearranjo do sistema de elétrons π causado por uma transferência protônica intramolecular no estado excitado. Tais compostos têm sido utilizados em geração de laser de corante, preparação de novos materiais com propriedades de ótica não linear, análise de sistemas biológicos e estudos em química computacional. Medidas espectroscópicas experimentais utilizando diversos solventes demonstraram grande solvatocromismo nas medidas de emissão do 4-(2'-benzoxazolil)-2,5-diidroxibenzoato de etila, o que sugere uma separação de carga nesse sistema. Desta forma o estudo computacional da fotofísica do referido composto foi realizado com o objetivo de elucidar tal comportamento, explicando os resultados experimentais. A otimização das geometrias foi feita pela utilização do método semi-empírico AM1 implementado no pacote MOPAC93. A simulação dos dados espectroscópicos de absorção e de emissão foi realizada empregando-se os métodos semi-empíricos INDO/S-CI e HAM/3. Todos os cálculos foram realizados em uma SiliconGraphics Origin 200 e num Cray Y-MP2E. Os cálculos apresentam grande concordância com os dados experimentais. Evidenciou-se a presença de espécies com separação de cargas, as quais desempenham um papel importante na fotofísica dos tautômeros envolvidos. Da mesma forma a estabilidade termodinâmica teórica das referidas estruturas mostrou-se concordante com os dados experimentais. (PROPESQ-UFRGS, CNPq, FAPERGS)