



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2015
<b>Local</b>	Porto Alegre - RS
<b>Título</b>	Estudo Teórico de Heterociclos e seu Emprego na Preparação de Novos Materiais com aplicação em Óptica Não-Linear.
<b>Autor</b>	ANA CAROLINA LONGONI DE CASTRO VICENTE
<b>Orientador</b>	PAULO FERNANDO BRUNO GONCALVES

# Estudo Teórico de Heterociclos e seu Emprego na Preparação de Novos Materiais com aplicação em Óptica Não-Linear.

Bolsista: Ana Carolina Longoni de Castro Vicente

Orientador: Prof. Dr. Paulo F. B. Gonçalves

Os processos de transferências protônicas podem ser considerados uns dos mais importantes para química e biologia, influenciando diretamente o setor tecnológico. A transferência de próton intramolecular pode ocorrer no estado excitado ou fundamental, dependendo da estrutura do composto. Quando ocorre no estado excitado, a transferência é chamada de ESIPT.

O ESIPT é um processo fotoinduzido onde há a transferência de um próton de um grupo doador para um grupo aceptor de próton. O ESIPT ocorre através de um mecanismo de foto-tautomerismo. Os compostos que emitem fluorescência a partir de um mecanismo ESIPT vem recebendo grande visibilidade no estudo teórico e experimental. Isso ocorre devido ao seu grande deslocamento de Stokes, o que faz com que essas moléculas sejam atrativas do ponto de vista tecnológico. Há inúmeras aplicações para estes compostos, como a estabilização de polímeros frente a radiação ultravioleta (UV), produção de corantes para laser, produção de materiais para opto-eletrônica e diversas aplicações em química forense, como, por exemplo, a detecção de impressões digitais.

O objetivo é estudar a influência dos efeitos: do solvente, dos ligantes e do heteroátomo X no composto no mecanismo ESIPT. Para isto utilizou-se química quântica computacional, o método utilizado é a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), implementado no programa Gaussian 09. Os funcionais utilizados nesse estudo foram o PBE1PBE e o CAM-B3LYP. Os efeitos do solvente foram avaliados utilizando o Modelo do Continuum Polarizável (PCM)<sup>10</sup>, com quatro solventes de diferentes constantes dielétricas.

Foi analisado o efeito do heteroátomo NH e O no heterociclo. Os solventes estudados foram: 1,4-dioxano, diclorometano, etanol e acetonitrila; a diferença de energia em (eV) entre o estado excitado e o estado fundamental é respectivamente -0,3; 0,2; 0,3 e 0,3 para os solventes citados respectivamente, com o heteroátomo NH. Para estrutura com o O a diferença de energia é 0,20; 0,26; 0,27 e 0,27. Além disso foi analisado a diferença de energia quando há a substituição de um H por NH<sub>2</sub> no anel benzazólico nas posições 4 e 5; os resultados são -0,114 eV (posição 4) e -0,116 eV (posição 5) para a estrutura com o heteroátomo NH, quando o O é o heteroátomo a diferença foi 0,023 eV e -0,011 eV nas posições 4 e 5 respectivamente. A diferença de energia quando há o nitrobenzeno no composto com o heteroátomo NH é -0,157 eV e quando é o O é -0,044eV.

Com os resultados obtidos até agora, observa-se a forte influência do solvente no ESIPT. Solventes mais polares dificultam a transferência protônica o único solvente que possibilita o ESIPT, no sistema estudado é o 1,4 dioxano. Em relação aos substituintes, observa-se que o grupo NH<sub>2</sub> nas posições 4 e 5 auxiliam no ESIPT quando a molécula tem o heteroátomo NH, já o grupo NO<sub>2</sub> no benzeno auxilia pouco. Nas moléculas com o O no heterociclo todos substituintes auxiliam. O funcional CAM-B3LYP prevê ESIPT apenas para as estruturas com o heteroátomo N<sub>2</sub> e utilizando o solvente 1,4 dioxano, enquanto o funcional PBE1PBE prevê o mecanismo para a todos os solventes, além disso, também prevê ESIPT quando o heteroátomo é o O, mas apenas com o solvente 1,4 dioxano.