



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2018: SIC - XXX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2018
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Físico-Química de Reações Fotofísicas em Estados Excitados: Transferência protônica em Oxazolinás
<b>Autor</b>	RAFAEL MILANO BORGES
<b>Orientador</b>	PAULO FERNANDO BRUNO GONCALVES

**Título: "Físico-Química de Reações Fotofísicas em Estados Excitados: Transferência protônica em Oxazolinás"**

**Autor:** Rafael Milano Borges

**Orientador:** Paulo F. B. Gonçalves

**Instituição:** Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

ESIPT (Excited State Intramolecular Proton Transfer) é um fenômeno fotoquímico no qual uma molécula absorve energia de um fóton para realizar uma transição eletrônica que é seguida de uma transferência de próton intramolecular, neste caso a forma enol (E) absorve o fóton passando ao primeiro estado excitado ( $E^* \leftarrow E$ ) e ao transferir o próton converte-se à forma ceto excitada ( $E^* \rightleftharpoons K^*$ ), subsequente à essa transferência ocorre a emissão de um fóton ( $K \leftarrow K^*$ ) fazendo com que o tautômero inicial seja regenerado ao voltar para o estado fundamental ( $K \rightleftharpoons E$ ). O interesse direcionado ao fenômeno ESIPT se deve principalmente por apresentar altos valores de Desvio de Stokes (diferença entre comprimentos de onda de absorção e emissão). Compostos nos quais esse fenômeno é observado possuem potencial aplicação em células solares, sensores moleculares, entre outros. De merecido destaque é a utilização de moléculas do tipo oxazolinás em síntese foto-assistida, como auxiliares de reação, além de apresentarem características apropriadas às aplicações anteriormente citadas.

Contando com auxílio de softwares apropriados de química quântica computacional, foi possível calcular as conformações de menor energia, tanto do estado fundamental como do primeiro estado excitado de ambas as formas presentes no equilíbrio ceto-enol e posteriormente realizar cálculos quanto às propriedades de absorção e emissão destas moléculas. No presente estudo foi utilizado o software Gaussian 16 para realização de cálculos baseados na Teoria do Funcional de Densidade (DFT) e sua variante depende do tempo (TD-DFT), em específico o funcional wB97XD - apropriado por apresentar correções de curto e longo alcance - com base cc-pVDZ para as otimizações das geometrias nos estados fundamental e excitado e com base jun-cc-pVTZ para as transições eletrônicas. O método de solvatação utilizado foi o Modelo do Contínuo Polarizável (PCM). Os valores obtidos para comprimentos de onda apresentaram boa concordância com os valores obtidos experimentalmente, tanto em relação à tendência dos erros como na descrição de efeitos de solvente.