

266

**ESTUDO TEÓRICO DA TRANSFERÊNCIA PROTÔNICA INTRAMOLECULAR NO ESTADO EXCITADO DO 2-(2-HIDROXIFENIL)BENZOXAZOL.** *Livia Streit, Leandro Greff da Silveira, Paolo Roberto Livotto (orient.) (UFRGS).*

Moléculas como o 2-(2-hidroxifenil)benzoxazol, abreviadamente HBO, apresentam reações de transferência protônica no estado excitado (ESIPT) que resultam em espectros de emissão com grande deslocamento de Stokes que tem grande interesse foto-físico e em aplicações tecnológicas. Neste trabalho apresentamos um estudo teórico *ab initio* do ciclo foto-físico de ESIPT do HBO, passando através dos estados excitados singlete e triplete, utilizando a base 6-311++G (2d, 2p) e o programa de cálculo quântico *Gaussian98*. Os resultados mostram que a forma enólica do HBO no estado fundamental é 16, 47 kcal/mol mais estável que a forma cetônica e uma barreira de retro-transferência do próton de somente 3, 82 kcal/mol. No estado excitado singlete a forma cetônica é mais estável em relação à forma enólica em 1, 20 kcal/mol, e no estado excitado triplete a forma enólica é mais estável que a forma cetônica por 0, 134 kcal/mol. As geometrias obtidas para os isômeros apresentam o conjunto de anéis benzazolil e fenila no mesmo plano, nos estados fundamental e excitado, o que concorda com o processo de fluorescência. (PIBIC).