

102

**ESTUDOS TEÓRICOS EM COMPOSTOS HETEROCÍCLICOS QUE APRESENTAM O MECANISMO DE TRANSFERÊNCIA PROTÔNICA INTRAMOLECULAR NO ESTADO ELETRÔNICO EXCITADO.***Maximiliano Segala e Valter Stefani* (Instituto de Química, UFRGS).

Compostos orgânicos com estruturas heterocíclicas do tipo benzazola possuem grande interesse fotofísico pois emitem fluorescência com grande deslocamento de Stokes devido a um mecanismo de transferência protônica intramolecular no estado eletrônico excitado. Tais compostos têm sido muito utilizados em geração de laser, análise de sistemas biológicos, preparação de novos materiais óticos e estudos em Química Teórica. Neste trabalho apresentamos os resultados obtidos pela análise computacional de diversos compostos de interesse (benzoxazolas, benzotiazolas e benzimidazolas), tendo sido realizados cálculos semi-empíricos para a determinação de variáveis como densidade eletrônica, distâncias interatômicas e momento dipolar. Os métodos utilizados foram o MNDO-PM3 e o AM1 presentes no programa MNDO94. Quanto aos métodos utilizados o primeiro mostrou ser o mais adequado para os cálculos das geometrias de todos os compostos, enquanto que o segundo mostrou ser o mais indicado para a determinação das densidades eletrônicas nos derivados que contêm nitrogênio. Os resultados obtidos encontram-se, em geral, dentro dos valores esperados. Entre os compostos estudados apresentou a menor distância na ponte N-HO a 2,5-bis(2'-benzotiazolil)hidroquinona. (CNPq, CESUP-UFRGS).