

215

**MODELAGEM E PREPARAÇÃO DE BIS-BENZAZOLAS PARA O DESENVOLVIMENTO DE DISPOSITIVOS ÓPTICOS.** *Sandro Hillebrand, Maximiliano Segala, Dione Silva Correa, Valter Stefani* (Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, UFRGS).

Matrizes fotocondutoras dopadas com moléculas orgânicas têm sido utilizadas no estudo e desenvolvimento de novos sistemas de armazenamento e transporte de dados, biosensores e outros dispositivos ópticos. Compostos da família das 2,5-bis(benzazolil)hidroquinonas são conhecidos por suas propriedades fotofísicas, de grande interesse em sistemas ópticos, e estabilidades térmica e fotoquímica. O objetivo deste trabalho é a modelagem de derivados dessa família, que apresentem grande momento de dipolo e atividade óptica não linear. Utilizando a química computacional como ferramenta para a modelagem molecular e previsão de propriedades físico-químicas, selecionaram-se alguns compostos para posterior síntese, purificação e teste de suas potencialidades. Para a otimização das estruturas e o cálculo dos parâmetros indicativos das propriedades enfocadas, utilizou-se o operador AM1 implementado no pacote Mopac93. Os cálculos, semi-empíricos, mostram bons resultados para bis-benzazolilhidroquinonas com substituintes eletrodoadores e aceptores nas posições 5' e 5". Para a preparação dos compostos utilizou-se metodologia sintética similar à já descrita por nosso grupo em trabalhos anteriores. Os resultados da síntese, caracterização e testes em materiais dopados serão divulgados oportunamente (CNPq, FAPERGS, PROPESQ e CESUP).