ACOPLAMENTO SPIN-ÓRBITA DE COMPOSTOS TETRAPIRRÓLICOS: UM ESTUDO TEÓRICO

Vinícius do Nascimento da Rocha [1]

Paulo Cesar Piquini [2]

Resumo:

A geração de oxigênio singleto por moléculas que são usadas em aplicações na terapia fotodinâmica (PDT) requer i) a absorção de luz visível ii) transição de estado excitado singleto para estado excitado tripleto com longo tempo de vida. Este processo é conhecido como cruzamento intersistema (ISC). O ISC é proibido em princípio, porém, o acoplamento spin-órbita (SOC) pode ser suficientemente grande entre os dois estados excitados para fazer isso possível. Compostos tetrapirrólicos como as porfirinas e os corróis, com funcionalização apropriada, tem sido amplamente investigados para o uso em PDT como candidatos a potentes fotossensibilizadores. Estes, tem longo tempo de vida no estado tripleto e alta absorção de luz visível, bem como, alto rendimento quântico na geração de oxigênio singleto. Nesta monografia avaliou-se as propriedades espectroscópicas, o SOC, as taxas de ISC na influência de diferentes ligantes aromáticos em porfirinas e corróis . O programa computacional GAUSSIAN foi utilizado para simulação das propriedades estruturais e eletrônicas, bem como, os espectros teóricos. Este programa emprega a Teoria do Funcional da Dependente do Tempo para a obtenção das energias de transição. Utilizou-se o funcional híbrido B3LYP para a o termo de troca e correlação. Os elementos de matriz do SOC entre os estados excitados singleto e tripleto foram calculados utilizando o programa MolSOC, que emprega um método não-interativo usando o operador completo de Breit Pauli.

Palavras-chave: Acoplamento Spin-órbita, DFT, TDDFT, Física

Modalidade de Participação: Iniciação Científica

ACOPLAMENTO SPIN-ÓRBITA DE COMPOSTOS TETRAPIRRÓLICOS: UM ESTUDO TEÓRICO

[1] Aluno de graduação. vininrocha.9083@gmail.com. Autor principal

[2] Docente. ppiquini@gmail.com. Orientador

ACOPLAMENTO SPIN-ÓRBITA DE COMPOSTOS TETRAPIRRÓLICOS: UM ESTUDO TEÓRICO

A geração de oxigênio singleto por moléculas que são usadas em aplicações na terapia fotodinâmica (PDT) requer i) a absorção de luz visível ii) transição de estado excitado singleto para estado excitado tripleto com longo tempo de vida. Este processo é conhecido como cruzamento intersistema (ISC). O ISC é proibido em princípio, porém, o acoplamento spin-órbita (SOC) pode ser suficientemente grande entre os dois estados excitados para fazer isso possível. Compostos tetrapirrólicos como as porfirinas e os corróis, com funcionalização apropriada, tem sido amplamente investigados para o uso em PDT como candidatos a potentes fotossensibilizadores. Estes, tem longo tempo de vida no estado tripleto e alta absorção de luz visível, bem como, alto rendimento quântico na geração de oxigênio singleto. Nesta monografia avaliou-se as propriedades espectroscópicas, o SOC, as taxas de ISC na influência de diferentes ligantes aromáticos em porfirinas e corróis . O programa computacional GAUSSIAN foi utilizado para simulação das propriedades estruturais e eletrônicas, bem como, os espectros teóricos. Este programa emprega a Teoria do Funcional da Dependente do Tempo para a obtenção das energias de transição. Utilizou-se o funcional híbrido B3LYP para a o termo de troca e correlação. Os elementos de matriz do SOC entre os estados excitados singleto e tripleto foram calculados utilizando o programa MolSOC, que emprega um método não-interativo usando o operador completo de Breit Pauli.