

Simulação de espectro UV-Vis de meso-tetrakis(p-sulfonatofenil)-porfirina, TPPS4, em meio ácido

Marcelo M. Tusi¹ (PG), Tânia T. Tominaga² (PQ), Julio M. Trevas dos Santos¹ (PQ)*

¹Departamento de Química e ²Departamento de Física. Universidade Estadual do Centro-Oeste, UNICENTRO. Campus CEDETEG, Rua Simeão Varela de Sá, 03, Vila Carli, Guarapuava, PR, 85040-080. e-mail: trevas@unicentro.br

Palavras Chave: INDO/S, UV-Vis, porfirina.

Introdução

Porfirinas e outros tetrapirróis relacionados ocorrem amplamente na natureza e têm importância fundamental em vários processos biológicos. Por possuírem um sistema pi conjugado, as porfirinas apresentam intensa absorção na região do UV-Visível, UV-Vis. Recentemente as porfirinas começaram a chamar a atenção por apresentarem potencial aplicação no diagnóstico e tratamento de câncer¹. Estudos² buscaram identificar o comportamento de algumas porfirinas em meio aquoso com variação de pH, simulando assim as condições limites e prevendo a injeção em corrente sanguínea. O que foi percebido é que o pH altera as propriedades eletrônicas observadas através de espectroscopia como a UV-Vis.

A fim de justificar os resultados obtidos experimentais para espectros UV-Vis, decidiu-se conduzir um estudo teórico computacional para simulação desses mesmos espectros. Na primeira etapa do trabalho efetuou-se a simulação da molécula meso-tetrakis(p-sulfonatofenil)-porfirina base livre, TPPS4, em sua forma protonada, simulando meio ácido.

Resultados e Discussão

Foram geradas várias conformações para a molécula TPPS4. Cada uma das conformações foi levada a cálculo INDO/S no programa ArgusLab³ para determinação dos comprimentos de onda e respectivas forças de oscilador na região UV-Vis.

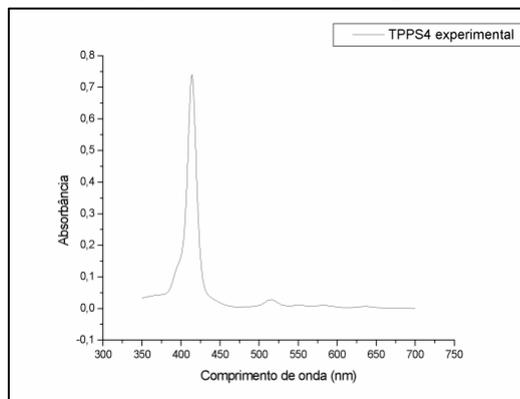


Figura 1. Espectro de absorção experimental.

A Figura 1 apresenta o espectro de absorção obtido experimentalmente para a molécula TPPS4 em água. A Figura 2 apresenta o espectro de absorção obtido dos cálculos INDO/S.

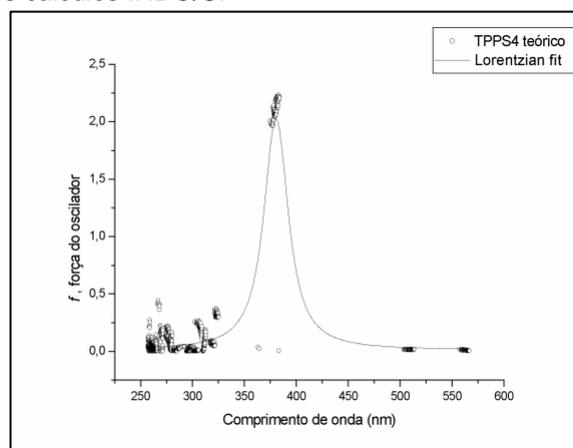


Figura 2. Espectro de absorção teórico.

Na Figura 2 foi ajustada uma curva sobre os pontos. A curva permitiu identificar o pico de absorção principal e compará-lo ao resultado experimental (Figura 1). Percebe-se uma excelente correlação, posição e intensidade, entre o pico teórico e o experimental.

Conclusões

Os resultados preliminares indicam que o estudo teórico-computacional poderá descrever o efeito do pH sobre as porfirinas de interesse farmacológico. Desse modo o estudo auxiliará na determinação das melhores condições de injeção dessas porfirinas em corrente sanguínea.

Agradecimentos

À Pró-reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação da UNICENTRO pelo apoio ao trabalho.

¹ YUSHMANOV, V. E.; TOMINAGA, T. T.; BORISSEVITCH, I. E.; IMASATO, H.; TABAK, M. *Magnetic Resonance Imaging*, **1996**, 14 (3), 255-261.

² TOMINAGA, T. T.; YUSHMANOV, V. E.; BORISSEVITCH, I. E.; IMASATO, H.; TABAK, M. *Journal of Inorg. Biochemistry*, **1986**, 65 (4), 235244.

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

³ THOMPSON, M. A. ArgusLab 4.0.1. Planaria Software LLC, Seattle, WA. Disponível em <<http://www.arguslab.com>>.