

# Espectro Eletrônico de Merocianinas em Solução Aquosa: Estudo Teórico

Eudes Eterno Fileti<sup>1,\*</sup> (PQ), Thaciana Malaspina<sup>1</sup> (PQ), Erick Leite Bastos<sup>1</sup> (PQ)

fileti@ufabc.edu.br

<sup>1</sup> Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC. Av. do Estado, 5001 – Bloco B. 09210-170 Santo André, SP, erick.bastos@ufabc.edu.br

Palavras Chave: merocianinas, dinâmica molecular, INDO.

## Introdução

Bromomerocianinas foram empregadas recentemente no estudo do comportamento de solvatação de solventes puros e misturas binárias.<sup>1</sup> Os híbridos de ressonância das merocianinas possuem contribuições de uma forma quinonóide e de uma forma zwitteriônica que são alteradas conforme as propriedades do meio de solvente. O estudo computacional destes fatores foi realizado em nível semiempírico CPCM/RM1.<sup>1</sup> Aqui apresentamos os resultados preliminares do estudo computacional s-QMMM do perfil de solvatação de uma bromomerocianina piridínica (sonda) por água.

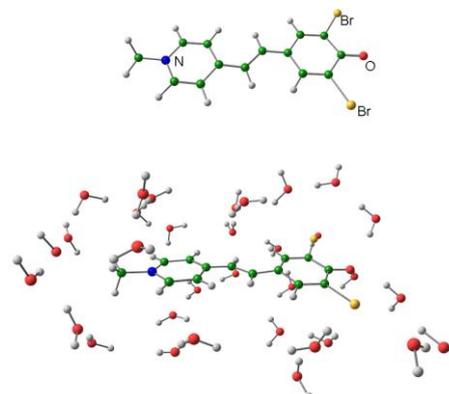
## Resultados e Discussão

Para a fase gasosa, as estruturas foram determinadas usando otimizações completas em nível B3LYP/6-311+G(d,p). Análise vibracional foi realizada para assegurar tais estruturas são de fato mínimos da superfície de energia potencial. Para os cálculos do espectro eletrônico usamos a metodologia INDO tal como implementada no programa VAMP. O espectro eletrônico foi calculado também para as moléculas em meio aquoso. Para isso adotamos o procedimento s-QMMM onde o valor médio do espectro é dado pela média sobre vários cálculos quânticos sobre configurações extraídas de simulações clássicas de dinâmica molecular. Tais simulações foram realizadas para cada molécula no ensemble NPT com  $T = 298$  K e  $P = 1$  atm. Os sistemas consistiram de ~1500 moléculas de água e uma molécula de soluto em uma caixa cúbica com condições periódicas de contorno usando a convenção de imagem mínima. Para a modelagem do líquido de água usamos o potencial SPC enquanto que para a sonda o potencial foi composto a partir de sítios do campo de força OPLS. As cargas parciais para as interações eletrostáticas foram determinadas usando o método ChelpG.

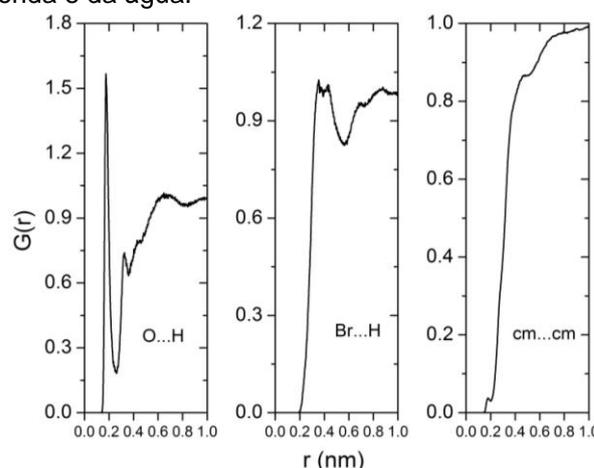
A Fig. 1 apresenta uma estrutura para o soluto em vácuo e também uma representação de uma estrutura de sua primeira camada de hidratação. As funções de distribuição radial de pares (Fig. 2)

indicam que, na média, existem 33 moléculas de água na primeira camada de solvatação.

**Figura 1.** Uma configuração típica da primeira camada de solvatação da cianina.



**Figura 2.** Distribuições radiais entre centros da sonda e da água.



## Conclusões

Foram iniciados estudos computacionais com abordagem s-QMMM para a investigação do papel da microsolvatação sobre o solvatocromismo de bromomerocianinas.

## Agradecimentos

FAPESP e CNPq; à UFABC pela infra-estrutura.

<sup>1</sup> Martins, C. T.; Lima, M. S.; Bastos, E. L.; El Seoud, O. A. *Eur. J. Org. Chem.* **2008**, 1165.