

Estudo teórico da ftalocianina de zinco: monômero, dímero e trímero.

Leonardo T. Ueno^{1*} (PQ), Antonio E. da Hora Machado(PQ)², Francisco B.C. Machado(PQ)³.

* tsuyoshi@pontal.ufu.br

¹Faculdade de Ciências Integradas do Pontal, Universidade Federal de Uberlândia, Av. José João Dib, 2545, Ituiutaba, CEP 38302-000, MG, Brasil

²Instituto de Química, Laboratório de Fotoquímica (LAFOT), Universidade Federal de Uberlândia, Av. João Naves de Ávila, 2121, Bloco 5K, Uberlândia, CEP 38408-100, MG, Brasil

³Instituto Tecnológico de Aeronáutica, Departamento de Química, Comando-Geral de Tecnologia Aeroespacial, São José dos Campos, CEP 12228-900, SP, Brasil

Palavras Chave: ftalocianina de zinco, espectro vibracional, efeito de solvente

Introdução

Ftalocianinas formam uma classe de compostos aromáticos que têm tido aplicações em áreas como terapia fotodinâmica, inibidores de corrosão, material antimicótico, sensores, etc. A ftalocianina de zinco tem sido muito estudada, entre outras coisas, pelo fato de apresentar espectro de absorção muito menos complexo que de ftalocianinas com outros metais de transição. Nesse trabalho¹ apresentamos um estudo das propriedades do estado fundamental da ftalocianina de zinco. A geometria foi obtida com as metodologias HF, DFT e MP2 com e sem a presença de solvente. O espectro IR do monômero foi obtido e comparado com o experimental. O fenômeno de agregação foi estudado com a otimização do dímero e do trímero da molécula. O espectro IR do dímero foi obtido e comparado com o do monômero.

Resultados e Discussão

O estudo teórico do estado fundamental da ftalocianina de zinco foi realizado com métodos HF, MP2 e DFT (funcional B3LYP) e a base 6-31G*. Estrutura planares (D_{4h}) foram obtidas com DFT e MP2, enquanto uma ligeiramente distorcida (C_{2v}) foi obtida com HF. Os parâmetros geométricos obtidos com DFT e MP2 são muito próximos dos valores experimentais, com diferenças das distâncias internucleares de, no máximo, 0,007 Å. O espectro vibracional da molécula isolada com valores de número de onda corrigidos, a fim de estimar os efeitos de anarmonicidade, apresenta grande concordância com o espectro experimental, sendo que a maior diferença entre esses relacionada à intensidade dos picos, provavelmente devido à base atômica adotada nos cálculos. A utilização de uma base mais extensa pode levar a uma melhoria nas intensidades, mas a um custo computacional muito elevado.

A influência da presença de solvente foi estimada com o uso do método PCM, com DMSO como solvente. Os parâmetros geométricos, cargas

32ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

atômicas e energias HOMO-LUMO foram pouco afetadas pela presença de solvente, mas as energias orbitais apresentaram uma considerável diminuição da energia.

Dímero e trímero da ftalocianina de zinco foram otimizados com os métodos B3LYP/(6-31G* no zinco e 6-31G nos demais átomos) e B3LYP/LanL2DZ, respectivamente. Os resultados indicaram a ocorrência de uma estrutura onde as moléculas externas apresentam uma ligeira perda da planaridade. O espectro IR do dímero apresenta grupos de picos similares ao obtido no monômero. As diferenças entre as intensidades dos picos dos espectros do dímero e do monômero devem ser provavelmente influenciados pelas bases atômicas diferentes adotadas. A energia de estabilização para a formação do dímero (9,21 kJ mol⁻¹) e do trímero (76,06 kJ mol⁻¹) indica que o processo de agregação é favorável, mesmo que no caso do trímero o valor esteja superestimado pelo uso da base atômica LanL2DZ.

Conclusões

O estado fundamental da ftalocianina de zinco foi estudado com métodos *ab initio* e DFT. Resultados de parâmetros geométricos, espectro IR, cargas atômicas foram obtidos, sem e com a presença de solvente. O espectro vibracional calculado do monômero é bastante semelhante com o experimental. O estudo do dímero e trímero da ftalocianina de zinco indicam que o processo de agregação é favorável, com as estruturas das moléculas ligeiramente diferentes do monômero isolado.

Agradecimentos

CNPq, FAPEMIG, LAFOT, Nanobrax e UFU.

¹ Ueno, L.T.; Machado, A.E.H. e Machado, F.B.C. *J. Mol. Struct.: THEOCHEM*, aceito para publicação.